

Coulombgass i To Dimensjoner

Gunnar Taraldsen

15.september 1987

Dette prosjektet er blitt til ved Institutt for Teoretisk Fysikk under veiledning av Kåre Olaussen.

Trondheim 15.september 1987
Gunnar Taraldsen

Innhold

I Innledende bemerkninger	iv
1 Modellen	1
2 Symboler og Konvensjoner	3
2.1 Enheter	3
II Elementær generell teori	6
3 Litt Elektrostatikk	7
3.1 Potensialet	7
3.2 Regularisering av potensialet	9
3.2.1 Store og små avstander	12
3.2.2 Alternativ regularisering	13
3.3 Dipolvekselvirkning	13
4 Statistisk Mekanikk for Partikkelsystem	16
4.1 Det Kanoniske Ensemble	16
4.1.1 Noen termodynamiske størrelser	19
4.2 Det Store Kanoniske Ensemble	19
4.2.1 Termodynamiske størrelser	20
4.3 Termodynamiske relasjoner	21
III Diverse angrepsmåter	24
5 To-dimensjonalt H-atom	25
5.1 Høye temperaturer	26
5.2 Lave temperaturer	26
5.2.1 Momenter	27
6 Hauge og Hemmers Resultat	28
6.1 Konfigurasjonsintegralet	28
6.2 Ladningsoverskudd per overflate	30

6.3	Kollaps?	31
6.4	Intuitiv behandling av tilfellet $T \leq 1/2$	31
6.5	Nær $T = 1/2$	32
7	Eksakte resultat	34
7.1	Formen til Den Store Kanoniske Partisjonsfunksjon	34
7.2	Energien og Varmekapasiteten	36
8	Debye-Hückel Tilnærmelsen	38
8.1	Debye-Hückel tilnærmelsen	38
IV	Formulering ved funksjonalintegral	42
9	Transformasjon på Sine-Gordon Teorien	43
9.1	Konfigurasjonsintegralet	44
9.2	Gauss integral trikket	46
9.3	Partisjonsfunksjonen	47
9.4	En raskere omskrivning	50
9.5	Stokastisk potensial	51
10	Saglios Partisjonsfunksjon	53
10.1	Partisjonsfunksjonen	53
10.2	Termene i Saglios formel	55
10.3	Saglios første ledd	55
10.4	Saglios andre ledd	58
11	En Høytemperaturutvikling	61
11.1	Regneregler	61
11.2	Momenter	64
11.3	En nyttig ulikhet	66
11.4	Varmekapasiteten	68
V	Oppsummering	69
VI	Appendiks	71
A	En Spesiell Rekke	72
VII	Referanser	75

Del I

Innledende bemerkninger

Kapittel 1

Modellen

Dette prosjektet handler om en klassisk todimensjonal Coulombgass.

Klassisk betyr her at partiklene beskrives av Newtons mekanikk og ikke av Kvantemekanikken. Kvantemekaniske gasser oppfører seg som klassiske ved høye temperaturer slik at det klassiske problemet alltid er inneholdt i det kvantemekaniske. Det klassiske problemet vil derfor alltid være av interesse.

Todimensjonal vil si at partiklene er begrenset til å bevege seg i to dimensjoner, d.v.s. i et plan. Grunnene til at det todimensjonale tilfellet er av interesse er mange:

I utgangspunktet kan man kanskje være opptatt av en ”vanlig” tredimensjonal gass, men oppdage at problemene der blir for uoverkomelige. Det vanlige skrittet da er å gå til forenklinger. Å studere det todimensjonale tilfellet er en slik forenkling. Faren er, som alltid ved forenklinger, at de effektene en ønsket å studere har forsvunnet eller radikalt har forandret seg. Som regel vil en slik forenkling allikevel føre til en øket forståelse av problemet.

Problemet i to dimensjoner har også ren akademisk interesse, men kan og knyttes mer eller mindre direkte til reelle fysiske problem. Kan nevne : Den todimensjonale ferromagnetiske XY-modell, Den endimensjonale Fermigass, Superflyttende og Superledende filmer, se f.eks. [36, 34]. Opprampsingen kan sikkert gjøres lengre. Koplingen til andre modeller har jeg dessverre ikke rukket å studere nærmere.

Systemet kalles en Coulombgass fordi kreftene mellom partiklene er gitt ved Coulombs elektrostatiske lov. Denne gir at kraftfeltets fluks ut av et volum er direkte proposjonal med ladningen innenfor volumet. Dette er akkurat som for Newtons gravitasjonslov. Forskjellen er bare at ”masse” byttes ut med ”ladning”. Formen til vekselvirkningen er derfor avhengig av problemets dimensjon. I to dimensjoner blir vekselvirkningen logaritmisk. Det er dette som fører til at det todimensjonale problemet blir noe spesielt:

For det første viser det seg at det fører til en kritisk temperatur for det termodynamiske systemet. Ser en på topartikkelpmodemet er det klart at partiklene vil kollapse sammen til et parr under denne temperaturen. Hvis en ikke innfører en hard kjerne , vil energien til systemet divergere. Over denne temperaturen vil de to partiklene gå fra hverandre og en må stenge de inne i et endelig volum, noe en alltid må når en ser på et endelig antall partikler termodynamisk. Denne oppførselen til topartikkelpmodemet gjenspeiles også

i N -partikkelpromblemet. Tilstrekkelig nær den kritiske temperaturen er det (antagelig) ingen forskjell på termodynamikken til 2 og N partikkelpromblemet. I tre dimensjoner finnes det derimot ingen slik kritisk temperatur, parr vil alltid være fullstendig ionisert i et uendelig volum. Denne lavtemperaturopførselen er hovedårsaken til at systemet er blitt og blir studert av så mange, j.m.f. referanselisten bak i rapporten. På NTH er det kanskje spesielt J.S.Høye og K.Olaussen som har studert gassen ved lave temperaturer,[7]. I mine litteraturstudier har jeg kun funnet en [35] som har løst hard kjerne promblemet ved å se på den kvantemekaniske gassen. En studie med utgangspunkt i formalismen i [11] synes nærliggende.

For det andre kan all volumavhengighet til termodynamiske størrelser finnes over den kritiske temperaturen. Blant annet finnes tilstandslikningen eksakt.

Kapittel 2

Simboler og Konvensjoner

2.1 Enheter

Jeg bruker SI enheter [?] på alle fysiske størrelser og følger de vanlige navnekonvensjonene når fundamentale likninger presenteres .

For å unngå å dra på for mange konstanter i beregninger innfører jeg imidlertid raskt dimensjonsløse størrelser. Dette øker også til en hvis grad forståelsen av de forskjellige parameterenes betydning.

Ved innføring av dimensjonsløse variable har jeg benyttet samme konvensjon som ??.
Størrelser med dimensjon merkes med * når det er viktig å skille dem fra de dimensjonsløse.

I det følgende vil jeg oppsummere og begrunne de viktigste valg jeg har endt opp med.

Ladningen til partikkelen nummer i har jeg kalt e_i^* . Disse gjøres dimensjonsløse ved å dividere ut med en midlere ladning e^* :

$$e_i \stackrel{\text{def}}{=} \frac{e_i^*}{e^*} \quad (2.1)$$

Den midlere ladningen, som er karakteristisk for mangepartikkelpromblemet defineres naturlig ved:

$$\sum_{i=1}^N e_i^{*2} = e^{*2} N \quad (2.2)$$

N brukes for å anngi det totale antall partikler. I noen sammenhenger er det påkrevet å dele partiklene opp i grupper etter hvilken type partikler som finnes, f.eks. positive og negative. Symbolet γ brukes for å anngi partikkeltypen. Tallet γ anngir samtidig ladningen til en partikkelen av type γ . Det vanlige vil være:

$$\gamma \in \{-1, +1\} \quad (2.3)$$

Men det er ikke noe krav generelt at γ bare skal ta et endelig antall verdier. Når γ er i bruk er det naturlig å ty til en multiindeksnotasjon. Da er f.eks.:

$$N = (N_\gamma) \quad (2.4)$$

$$z = (z_\gamma) \quad (2.5)$$

Multiindeksnotasjonen innebærer blant annet forkortelsene:

$$\frac{z^N}{N!} = \frac{\prod_\gamma z_\gamma^{N_\gamma}}{\prod_\gamma N_\gamma!} \quad (2.6)$$

$$|N| = \sum_\gamma N_\gamma \quad (2.7)$$

Når det gjelder den siste så er jeg litt slurve og bruker N i stedet for $|N|$ der det (helst) ikke kan misforstås. I motsetning til dette vil z ikke stå for summen av fugasitetene når det symmetriske tilfellet $z_+ = z_- = z$ betraktes.

Vekselvirkningsenergien, som bestemmer energiskalaen, vil ha følgende form i det D -dimensjonale tilfellet:

$$V_R^* = \frac{e_1^* e_2^*}{\omega_D \epsilon_0^*} \cdot V = e_1 e_2 \frac{e^{*2}}{\omega_D \epsilon_0^*} \cdot V \quad (2.8)$$

Her er ω_D den $(D - 1)$ -dimensjonale overflaten til enhetskula.

Da energien alltid vil inngå veid opp mot temperaturen T^* er det greit å innføre dimensjonsløse størrelser:

$$V_R = e_1 e_2 \cdot V \quad (2.9)$$

$$k_B^* T^* = T \cdot \frac{e^{*2}}{\omega_D \epsilon_0^*} \quad (2.10)$$

$$\beta = T^{-1} \quad (2.11)$$

$$\beta^* V_R^* = \beta V_R \quad (2.12)$$

Hvor den siste likningen kommer inn i de termodynamiske ensembler.

Det som er viktig å merke seg ved likning (2.9) er at å se på systemet ved høye temperaturer er det samme som å se på et system med svakere vekselvirkning, d.v.s. mindre e^* .

For vilkårlige (matematiske) funksjoner benytter jeg symbolene f, g, h . Disse beholder ikke nødvendigvis sine definisjoner fra en forekomst til en annen.

Tilsvarende gjelder for vilkårlige konstanter A, B, C . Heltallige tellevariable betegnes med $i, j, k, l, mogn$.

Fysiske størrelser som går igjen gjennom hele rapporten beholder sitt symbol så langt det lar seg gjennomføre. Har også søkt åreservere et spesifikt symbol for hver enkelt fysisk størrelse. Et unntak som er verdt å nevne er V som både brukes om volumet og om den potensielle energien, men det er få sammenhenger hvor dette kan misforstås.

Del II

Elementær generell teori

Kapittel 3

Litt Elektrostatikk

Dette er det aller nødvendigste grunnlag for forståelsen av vekselvirkningen en her ser på.
Avslutter dette kapittelet med en beregning av dipolvekselvirkning i to dimensjoner.

3.1 Potensialet

Tar utgangspunkt i en generell formulering av Coulombs lov:

$$\int_S \vec{E} \hat{n} ds = \int_S E_i ds^i = Q/\epsilon_0, \quad i = 1, 2, \dots, D \quad (3.1)$$

hvor:

\vec{E} :Den elektriske feltvektor

\hat{n} :Utdrettet flateenhetsnormalvektor

S :Overflaten til et volum V som inneholder Q.

Q :Ladning innenfor volumet V.

$\epsilon_0 = (c^2 \mu_0)^{-1}$, Tomromspermittiviteten

$\mu_0 \stackrel{\text{def}}{=} 4\pi \cdot 10^{-7} kg \cdot m/(s^2 \cdot A^2)$, tomromspermeabiliteten¹

$c = 2,99792458 \cdot 10^8 m/s$, Lysfart i tomt rom

Vil så finnefeltet utenfor en kulesymetrisk ladningsfordeling om origo i D dimensjoner.
Pr. antagelse vil da \vec{E} være radielt rettet og kun avhenge av avstanden r fra origo:

¹Denne definisjon finnes i f.eks. [?, s.71]. Kommer i forbindelse med definisjon av grunnenheten A for elektrisk strømstyrke i tre dimensjoner.

$$Q/\epsilon_0 \stackrel{(3.1)}{=} E \cdot \omega_D \cdot r^{D-1} \Rightarrow E(r) = \frac{Q}{\epsilon_0 \omega_d} r^{1-D} \quad (3.2)$$

hvor:

ω_d : Overflaten til enhetskula i d dimensjoner.

Det elektriske potensialet Φ er definert ved at:

$$\vec{E} \stackrel{\text{def}}{=} -\text{grad}\Phi \Rightarrow \Phi = -\frac{Q}{\epsilon_0 \omega_d} \frac{r^{2-d}}{2-d} + C^*, d \geq 3 \quad (3.3)$$

$$\Phi = -\frac{Q}{\epsilon_0 \omega_d} \ln \frac{r}{L}, d = 2 \quad (3.4)$$

C^* og L er fritt valgbare konstanter, og man velger som regel $C^* = 0$ slik at $\Phi(\infty) = 0$. Den muligheten har man ikke for L . Det er rimelig å velge L lik en stor avstand relativt til andre avstander i problemet. For denne store avstanden får man da $\Phi(L*) = 0$.

Divergensteoremet benyttet på likning (3.1), gir at likning (3.3) er løsningen til :

$$Q/\epsilon_0 = \frac{1}{\epsilon_0} \cdot \int dV e\rho(r) = \int dS \vec{E} \hat{n} = \int dV \text{div} \vec{E} \quad (3.5)$$

$$(3.6)$$

$$\Downarrow \text{likning}(3.3) \quad (3.7)$$

$$(3.8)$$

$$-\nabla^2 \Phi = \frac{e}{\epsilon_0} \rho(r) \quad (3.9)$$

hvor:

$e\rho(r)$: Den kulesymmetriske ladningstetthet

Spesielt hvis all ladningen er plassert i origo:

$$-\nabla^2 \Phi = \frac{e}{\epsilon_0} \delta(\vec{r}) \quad (3.10)$$

hvor:

$\delta(\vec{r})$: Den d-dimensjonale δ - distribusjon.

Likning (3.10) følger direkte av integralformuleringen i likning (3.1), som må til for korrekt tokning av $\delta(\vec{r})$.

Likning (3.3) er ikke definert ved $r = 0$. I to dimensjoner vil man heller ikke få oppfylt $\Phi(\infty) = 0$. Det er rimelig å anta at Coulombs lov ikke gjelder for alle avstander. Empirisk har man da også bare dekning for Coulombs lov ved: $10^{-18}m \sim a \ll r \ll L \sim 10^{16}m^2$

I mangel av informasjon om de nevnte skalaer, kan det være rimelig å la det elektrostatiske potensial fra en partikkelf i to dimensjoner være:

$$\Phi = \begin{cases} -\frac{Q}{\epsilon_0 \omega_d} \ln \frac{a}{L}, & r \leq a \\ -\frac{Q}{\epsilon_0 \omega_d} \ln \frac{r}{L}, & a < r < L \\ 0, & L \leq r \end{cases} \quad (3.11)$$

3.2 Regularisering av potensialet

Skal i det følgende se på et system bestående av to typer partikler. De skal ha ladning henholdsvis $+e$ og $-e$, og de indekseres naturlig med $\gamma \in \{-, +\}$. Den verdenen de lever i er et to-dimensjonalt volum V , og de skal ha Coulomb-vekselvirkning.

Den potensielle energien V_c mellom to partikler må da oppfylle den to-dimensjonale Poissonlikningen,j.m.f. likning (3.10):

$$-\nabla^2 V_c = \frac{e_1 e_2}{\epsilon_0} \delta(\vec{r}) \quad (3.12)$$

Hvor:

\vec{r} , Todimensjonale vektor som angir posisjon til partikkelf 2 i forhold til partikkelf 1 .

ϵ_0 , Dielektrisitetskonstanten for vakum.

$\delta(\vec{r})$, Den todimensjonale delta-funksjonen (distribusjonen)

Har fra foregående avsnitt:

$$\nabla^2 \frac{\ln |\vec{r}|}{2\pi} = \delta(\vec{r}) \quad (3.13)$$

Som gir vekselvirkningsenergien:

²[12, s.3] angir dette (a) som en øvre skranke på leptoners radius. Den andre skranken følger av min overbevisning om at likning (3.1) ikke er empirisk understøttet på avstander av størrelsesordenen et lysår. Uansett de numeriske verdiene her vil slike skranker finnes. Dette siste er i hvert fall en påstand som er vanskelig å motbevise...

$$V_c(\vec{r}) = -\frac{e_1 e_2}{2\pi\epsilon_0} \ln \frac{r}{L} \quad (3.14)$$

Hvor:

L er en valgbar konstant med $[L] = \text{meter}$.

r er absoluttverdien til (\vec{r}) .

Innfører nå dimensjonsløs ladning e ved midlere ladningsabsoluttverdi til partiklene $e^* = <|e_i^*|>$:

$$e_i = e_i^*/e^* \quad (3.15)$$

Tilsvarende gjøres energier dimensjonsløse ved energikonstanten $\frac{e_1 e_2}{2\pi\epsilon_0}$. Dette gir:

$$V_c(\vec{r}) = -e_1 e_2 \ln \frac{r}{L} \quad (3.16)$$

V_c har ubehagelig oppførsel både ved små og store avstander. Kraften ($\propto r_{12}^{-1}$) mellom to partikler går riktignok mot null ved $r_{12} \rightarrow \infty$, men:

$$V_c(r) \rightarrow -\infty \cdot e_1 e_2, \text{ når } r \rightarrow \infty \quad (3.17)$$

Man kan altså ikke velge L slik at $V_c(\infty) = 0$, som jo er et naturlig valg. To partikler i uendelig avstand fra hverandre, burde fysisk sett ikke gi opphav til vekselvirkningsenergi (hvis man skal la energien ha en absolutt betydning). Dette problemet har man som kjent ikke i tre dimensjoner (eller $d \geq 3$). Dette kan omgås ved å innføre Yukawa's potensial definert ved:

$$(-\nabla^2 V_y + \epsilon^2 V_y) = \frac{e_1 e_2}{\epsilon_0} \delta(\vec{r}) \quad (3.18)$$

Som går over i V_c ved $\epsilon^2 \rightarrow 0$. ϵ kan tolkes som massen til partiklene som skaper vekselvirkninger mellom γ_1 og γ_2 partiklene. Man har latt de masseløse fotonene få en masse og kaller de for (skalar)mesoner.

Det er kjent at:³

$$(-\nabla^2 + \epsilon^2) \frac{K_0(\epsilon r)}{2\pi} = \delta(\vec{r}), \quad r = |\vec{r}| \quad (3.19)$$

Som gir:

³For 0'te ordens modifiserte Bessel-funksjon av 2. slag tillater jeg meg å bruke symbolet K_0 .

$$V_Y = \frac{e_1 e_2}{2\pi\epsilon_0} K_0(\epsilon r) \quad (3.20)$$

Et mindre alvorlig problem er divergensen i origo:

$$V_{C,Y}(r) \rightarrow e_1 e_2 \infty, r \rightarrow 0 \quad (3.21)$$

Når motsatt ladete partikler kommer nær hverandre, vil imidlertid likning (3.21) være ubehagelig å håndtere i et termodynamisk ensemble.⁴ Definerer derfor den Fouriertransformerte til et regularisert potensial, \tilde{V}_R , ved:

$$\tilde{V}_R = \mathcal{F}V_R = \int d\vec{r} V_R(r) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \stackrel{\text{def}}{=} e_1 e_2 2\pi \left(\frac{1}{k^2 + \epsilon^2} - \frac{1}{k^2 + \Lambda^2} \right), \epsilon \ll \Lambda \quad (3.22)$$

Ved inverstransf. og likning (3.19) fåes:

$$V_R = e_1 e_2 (K_0(\epsilon r) - K_0(\Lambda r)), \epsilon \ll \Lambda \quad (3.23)$$

For å vise at problemet likning (3.21) er løst:

$$\frac{V_R(0)}{e_1 e_2} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty 2\pi k dk 2\pi \left(\frac{1}{k^2 + \epsilon^2} - \frac{1}{k^2 + \Lambda^2} \right) e^0 \quad (3.24)$$

$$= \frac{1}{2} [\ln(k^2 + \epsilon^2) - \ln(k^2 + \Lambda^2)]_0^\infty \quad (3.25)$$

$$= \frac{1}{2} (\lim_{k \rightarrow \infty} \ln \frac{k^2 + \epsilon^2}{k^2 + \Lambda^2} - \ln \frac{\epsilon^2}{\Lambda^2}) \quad (3.26)$$

$$= \ln \frac{\Lambda}{\epsilon} = \frac{1}{2} \ln \frac{\Lambda^2}{\epsilon^2} \quad (3.27)$$

Som også følger fra en liten avstandsrekkeutvikling av K_0 . Med antagelsen $\epsilon \ll \Lambda$ omskrives likning (3.22):

$$\frac{\tilde{V}_R(k)}{e_1 e_2} = 2\pi \left(\frac{1}{k^2 + \epsilon^2} - \frac{1}{k^2 + \Lambda^2} \right) \simeq 2\pi \frac{\Lambda^2}{k^4 + \Lambda^2 k^2 + \Lambda^2 \epsilon^2} \quad (3.28)$$

$$\Updownarrow \quad (3.29)$$

$$(\nabla^4 \Lambda^{-2} - \nabla^2 + \epsilon^2) \frac{V_R(r)}{2\pi} \simeq e_1 e_2 \delta(\vec{r}), \epsilon \ll \Lambda \quad (3.30)$$

Likning 3.28 kunne vært tatt som definisjon av V_R , mens likning (3.22) var tilnærmelsen. Likning (3.28) gir i hvertfall klart at V_R går over i V_Y ved $\Lambda \rightarrow 0$.

⁴Potensialet blir logaritmisk ved små avstander. Se f.eks. $\int_0^\infty dr e^{-ln(r)} = [ln(r)]_0^\infty$

3.2.1 Store og små avstander

V_R bør redusere seg til V_Y i grensen $\frac{1}{\Lambda} \ll r$. At dette er tilfelle sees fra⁵ :

$$V_R(r) = V_Y - e_1 e_2 \sqrt{\frac{\pi}{2\Lambda r}} e^{-\Lambda r} \left\{ 1 - \frac{1}{8\Lambda r} + \mathcal{O}((\Lambda r)^{-2}) \right\} \quad (3.31)$$

Videre bør V_R redusere seg til V_C i en grense. Denne sees å være $\frac{1}{\Lambda} \ll r \ll \frac{1}{\epsilon}$:

$$\frac{V_R(r)}{e_1 e_2} = -\left\{ \ln \frac{\epsilon r}{2} + \gamma \right\} (1 + \mathcal{O}((\epsilon r)^2)) \quad (3.32)$$

$$+ \mathcal{O}((\epsilon r)^2) - \sqrt{\frac{\pi}{2\Lambda r}} e^{-\Lambda r} \left\{ 1 - \frac{1}{8\Lambda r} + \mathcal{O}((\Lambda r)^{-2}) \right\} \quad (3.33)$$

$$= -\ln \left(\frac{\epsilon r}{2} e^\gamma \right), \frac{1}{\Lambda} \ll r \ll \frac{1}{\epsilon} \quad (3.34)$$

$\gamma = 0.5772157\dots$ er Eulers konstant. Her spiller $2e^{-\gamma}\epsilon^{-1}$ samme rolle som L i likning (3.14). $\epsilon \rightarrow 0$ tilsvarer $L \rightarrow \infty$. Likning (3.32) understøtter valget av V_R . Ved å ta $\Lambda \rightarrow \infty$ og $\epsilon \rightarrow 0$ etter den termodynamiske grensen, froventes resultater for Coulombgassen. To grenser til er interessante. Anta $r \ll \frac{1}{\Lambda}$ for å se på liten avstand oppførselen. Da $\epsilon \ll \Lambda$ alltid antas fås $\epsilon r \ll \lambda r \ll 1$:

$$\frac{V_R(r)}{e_1 e_2} \simeq -\ln \left(\frac{\epsilon r e^\gamma}{2} \right) + \left(\frac{\epsilon r}{2} \right)^2 + \ln \left(\frac{\Lambda r e^\gamma}{2} \right) \left\{ 1 + \left(\frac{\Lambda r}{2} \right)^2 \right\} + \left(\frac{\Lambda r}{2} \right)^2 \quad (3.35)$$

$$= \ln \frac{\Lambda}{\epsilon} + \ln \frac{\Lambda r e^\gamma}{2} \left(\frac{\Lambda r}{2} \right)^2 - \ln \left(\frac{\epsilon r e^\gamma}{2} \right) \left(\frac{\epsilon r}{2} \right)^2 \quad (3.36)$$

$$\simeq \ln \frac{\Lambda}{\epsilon} + \ln \frac{\Lambda r}{2} \left(\frac{\Lambda}{2} \right)^2, \epsilon r \ll \Lambda r \ll 1 \quad (3.37)$$

Det er altså Λ som bestemmer oppførsel til V_R ved små avstander. Merk at ϵ inngår i $V_R(0)$! Ikke uvventet da den gir energiens nullpunkt ved $r \rightarrow \infty$.

Den siste grensen er $1 \ll \epsilon r \ll \Lambda r$ som skal gi stor avstands oppførselen:

$$\frac{V_R(r)}{e_1 e_2} \simeq +\sqrt{\frac{\pi}{2\epsilon r}} e^{-\epsilon r} - \sqrt{\frac{\pi}{2\Lambda r}} e^{-\Lambda r} \quad (3.38)$$

$$\simeq \sqrt{\frac{\pi}{2\epsilon r}} e^{-\epsilon r}, 1 \ll \epsilon r \ll \Lambda r \quad (3.39)$$

Og som ventet bestemmer ϵ oppførselen ved store avstander.

ϵ^{-1} spiller rollen som en skjermingslengde og Λ^{-1} rollen som en hard kjerne.

⁵Egenskapene til K_0 har jeg hentet fra [25]

3.2.2 Alternativ regularisering

En alternativ regularisering:

$$V_R^H(r) = K_0(m_0(r^2 + a^2)^{\frac{1}{2}}) \quad (3.40)$$

blir benyttet i [38, s.35]. Den gir:

$$V_R^H \simeq \sqrt{\frac{\pi}{2m_0r}} e^{-m_0r}, m_0r \gg 1, r \gg a \quad (3.41)$$

$$V_R^H \simeq \ln 2e^{-\gamma} m_0^{-1} (r^2 + a^2)^{-\frac{1}{2}}, m_0r \ll 1 \quad (3.42)$$

$$\simeq \ln(2e^{-\gamma} m_0^{-1} a^{-1}), m_0r \ll 1, r \ll a \quad (3.43)$$

Altså spiller m_0 samme rolle som min ϵ , og a samme rolle som Λ^{-1} .
 V_R^H i likning (3.40) har Fouriertransformasjon:

$$\tilde{V}_R^H = 2\pi \frac{a^2}{k^2 + m_0^2} (k^2 + m_0^2)^{\frac{1}{2}} K_1(a(k^2 + m_0^2)^{\frac{1}{2}}) \quad (3.44)$$

V_R^H er derfor ikke Green-funksjonen til noen enkel diff.operator som i (3.28) på side 11.[38, s.54] benytter forøvrig :

$$\tilde{V}_R^H = \frac{1}{k^2 + m_0^2} \quad (3.45)$$

D.v.s. at $a \rightarrow 0$ er tatt før den termodynamiske grense, som ikke skulle spille noen rolle i høytemperaturtilfellet.

3.3 Dipolvekselvirkningsenergi

Vil finne et uttrykk for vekselvirkningsenergien mellom to dipoler.

Dimensjonsløs potensiell energi:

$$V_d = \ln \frac{r_{+-}r_{-+}}{r_{++}r_{--}} \quad (3.46)$$

Grensetilfeller i geometrien:

Figur 3.1: To dipoler som vekselvirker. Forutsetter $d_1, d_2 \ll r$.

$$d_1 = d_2 = 0 \Rightarrow r_{+-} = r_{-+} = r_{--} = r_{++} = r \quad (3.47)$$

$$\alpha_1 = \alpha_2, d_1 = d_2 \Rightarrow r_{++} = r_{--} = r, r_{+-}^2 = r_{-+}^2 = d_1^2 + r^2 + 2d_1r \cos \alpha_1 \quad (3.48)$$

$$\alpha_1 = \alpha_2 = 0 \Rightarrow r = \frac{d_1}{2} - \frac{d_2}{2} + r_{++} = r_{+-} + \frac{d_1}{2} + \frac{d_2}{2} \quad (3.49)$$

$$= r_{--} - \frac{d_1}{2} + \frac{d_2}{2} = r_{-+} - \frac{d_1}{2} - \frac{d_2}{2} \quad (3.50)$$

Vil finne δ 'er slik at:

$$r_{+-} = r + \delta_{+-}r, \text{ etc.} \quad (3.51)$$

Har:

$$r_{++}^2 = \left(-\frac{\vec{d}_1}{2} + \vec{r} + \frac{\vec{d}_2}{2}\right)^2 \simeq r^2 + 2\vec{r}\left(\frac{\vec{d}_2}{2} - \frac{\vec{d}_1}{2}\right) \quad (3.52)$$

$$= r^2 + r(d_2 \cos \alpha_2 - d_1 \cos \alpha_1) \Rightarrow \quad (3.53)$$

$$r_{++} \simeq r\left(1 + \frac{d_2 \cos \alpha_2 - d_1 \cos \alpha_1}{2r}\right), \quad \delta_{++} = \frac{d_2 \cos \alpha_2 - d_1 \cos \alpha_1}{2r} \quad (3.54)$$

Og videre:

$$r_{--}^2 = \left(\frac{\vec{d}_1}{2} + \vec{r} - \frac{\vec{d}_2}{2}\right)^2 \Rightarrow \delta_{--} = \frac{-d_2 \cos \alpha_2 + d_1 \cos \alpha_1}{2r} \quad (3.55)$$

$$r_{+-}^2 = \left(-\frac{\vec{d}_1}{2} + \vec{r} - \frac{\vec{d}_2}{2}\right)^2 \Rightarrow \delta_{+-} = \frac{-d_2 \cos \alpha_2 - d_1 \cos \alpha_1}{2r} \quad (3.56)$$

$$r_{-+}^2 = \left(-\frac{\vec{d}_1}{2} + \vec{r} - \frac{\vec{d}_2}{2} \right)^2 \Rightarrow \delta_{-+} = \frac{d_2 \cos \alpha_2 + d_1 \cos \alpha_1}{2r} \quad (3.57)$$

$$\delta_{-+} = -\delta_{+-} = \delta_1 + \delta_2 \quad (3.58)$$

$$\delta_{--} = -\delta_{++} = \delta_1 - \delta_2 \quad (3.59)$$

Dette gir:

$$V_d \simeq \ln \frac{(1+\delta_{+-})(1+\delta_{-+})}{(1+\delta_{++})(1+\delta_{--})} = \ln \frac{1+\delta_{+-}+\delta_{-+}+\delta_{+-}\delta_{-+}}{1+\delta_{++}+\delta_{--}+\delta_{++}\delta_{--}} \quad (3.60)$$

$$= \ln \frac{1-\delta_{-+}^2}{1-\delta_{--}^2} \simeq \ln (1 - \delta_{-+}^2)(1 + \delta_{--}^2) \quad (3.61)$$

$$\simeq \ln (1 - (\delta_1 + \delta_2)^2 + (\delta_1 - \delta_2)^2) \quad (3.62)$$

$$= \ln (1 - 4\delta_1\delta_2) \simeq -4\delta_1\delta_2 = -4 \frac{d_1 d_2 \cos \alpha_2 \cos \alpha_1}{4r^2} \quad (3.63)$$

$$V_d \simeq -\frac{d_1 d_2}{r^2} \cos \alpha_2 \cos \alpha_1 = -\frac{1}{r^2} (\vec{d}_2 \hat{r}) (\vec{d}_1 \hat{r}) \quad (3.64)$$

Ved lik orientering fåes frastøting.

Som en pertubasjon på å betrakte partiklene som uavhengige parr er likning (??) et mulig utgangspunkt.

Kapittel 4

Statistisk Mekanikk for Partikkelsystem

Anta at man har et system med forskjellige vekselvirkende partikler. Systemet kan da beskrives i tre forskjellige ensemble: Det Mikrokanoniske, Det Kanoniske og Det Store Kanoniske. I alle tre tilfellene tenkes partiklene plassert i et D-dimensjonalt volum V som er i kontakt med et ∞ -innholdsrikt reservoar. Verden består av systemet + reservoaret.

Det Mikrokanoniske Ensemble er gitt ved at systemet er fullstendig lukket, hverken varme eller partikler kan utveksles med reservoaret. Her er reservoarets eksistens overflødig.

Det Store Kanoniske Ensemble kjennetegnes ved at varme kan utveksles med reservoaret. Reservoarets tenkte fikserte T gir da at systemet også må ha temperatur T .¹ Antall partikler N er gitt.²

I Det Store Kanoniske Ensemble kan også partikler utveksles med reservoaret. For hvert partikkelslag tenkes en ny størrelse fiksert. Denne størrelsen, det kjemiske potensialet μ , bestemmer hvor lysten systemet er på de forskjellige partikkelslagene (d.v.s. tettheten).

Den Termodynamiske Grense er et annet nøkkelbegrep. Den består i og la antall partikler N og volumet V gå mot uendelig, men slik at tettheten n forblir konstant.

4.1 Det Kanoniske Ensemble

Hvis systemet er i likevekt med et varmereservoar og antall partikler i systemet er gitt, fåes den Kanoniske fordeling:

$$\rho_N(p, q) = \frac{e^{\beta(F - H_N(p, q))}}{h^{N|D} N!} \quad (4.1)$$

Hvor:

¹Faktisk ved definisjon av T! J.m.f. [2, s.41].

²Eventuelt trykket p,[3, s.?].

p angir alle partiklenes impulser. $p = (p_\gamma)$, $p_\gamma = (p_{n_\gamma})$ og $p_{n_\gamma} = (p_{n_\gamma}^d)$. γ angir partikkeltypen, f.eks. $\gamma \in \{+, -\}$. n_γ angir n'te partikkelen av type γ , $n_\gamma \in \{1, \dots, N_\gamma\}$. $d \in \{1, \dots, D\}$ hvor D er problemets dimensjon.

q gir tilsvarende posisjonene.

F er Helmholtz frie energi.

H_N er energien/Hamiltonfunksjonen til systemet.

$\beta = 1/(k_B T)$ hvor k_B er Boltzmanns konstant.

h er Plancks konstant.

$N! = \prod_\gamma N_\gamma!$ og $|N| = \sum_\gamma N_\gamma$ i multiindeksnotasjonen. N_γ er antall partikler av type γ , $N = (N_\gamma)$.

Det essensielle i likning (4.1) er $n_N(p, q) \propto e^{-\beta H_N(p, q)}$ som klassisk kan forsvarer ut fra Liouville likningen som gir funksjonallikn. $n[K_1 + K_2] = n[K_1] + n[K_2]$ hvor $K_1 + K_2$, K_1 og K_2 er henholdsvis bevegelseskonstanter for det totale system og de to delsystem. Det enkleste valg er å la n avhenge av p, q bare gjennom energien. Den peneste begrunnelsen for dette finnes kanskje i den kvantemekaniske versjonen, hvor man går veien om entropien til systemet, [2].

De øvrige ledd i likning (4.1) er å betrakte som normeringskonstanter. Det kan vises at valget over virkelig gir at F er Helmholtz frie energi slik den er definert i termodynamikken.

La $A(p, q)$ være en fysisk størrelse avhengig av impuls og posisjonskonfigurasjon. Det statistiske middel er da:

$$\langle A \rangle = \int dp dq n_N A \quad (4.2)$$

Her går integrasjonen over hele faserommet, d.v.s. impulser p fra $-\infty$ til $+\infty$ og koordinater q over det aktuelle D -dimensjonale volum, V .

Normeringskravet $\langle 1 \rangle = 1$ gir via likning (4.1) og likning (4.2) den viktige partisjonsfunksjonen:

$$Z_N(V, \beta) = e^{-\beta F} = \int dp dq e^{-\beta H_N(p, q)} / (h^{d|N|} N!) \quad (4.3)$$

Svært ofte vil energien være gitt ved:

$$H_N = \sum_{\gamma, i_\gamma} \frac{{p_{i_\gamma}}^2}{2m_\gamma} + V_N(q) \quad (4.4)$$

$V_N(q)$ er den potensielle energien til en gitt koordinatkonfigurasjon (q). For størrelser som ikke avhenger av impulsfordelingen trenger man da:

$$\begin{aligned}
\int dp e^{-\beta \sum_{\gamma, i_\gamma} \frac{p_{i_\gamma}}{2m_\gamma}^2} &= \prod_{\gamma, i_\gamma} \int dp_{i_\gamma} e^{-\beta \frac{p_{i_\gamma}}{2m_\gamma}^2} \\
&= \prod_{\gamma, i_\gamma} \left(\sqrt{\frac{m_\gamma}{\beta}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2}} \right)^D \stackrel{(\text{??})}{=} \prod_{\gamma} \left(\sqrt{\frac{m_\gamma 2\pi}{\beta}} \right)^{DN_\gamma} \\
&= \left(\frac{m 2\pi}{\beta} \right)^{DN/2}
\end{aligned} \tag{4.5}$$

Verdien til Gauss integralet som ble benyttet i nest siste overgang, er sentral i dette prosjektet. I siste overgang ble følgende multiindeks notasjon benyttet: $t^N = \prod_{\gamma} t_{\gamma}^{N_{\gamma}}$.

Dette gir spesielt:

$$Z_N = \frac{\int dq e^{-\beta V_N(q)}}{(h^2 \beta / 2\pi m)^{DN/2} N!} = \frac{Q_N}{\Lambda^{DN} N!} \tag{4.6}$$

Konfigurasjonsintegralet er dermed def. ved:

$$Q_N(V, \beta) \stackrel{\text{def}}{=} \int dq e^{-\beta V_N(q)} \tag{4.7}$$

Og den termiske de Broglie bølgelengden:

$$\Lambda_{\gamma} \stackrel{\text{def}}{=} \left(\frac{h^2 \beta}{2\pi m_{\gamma}} \right)^{1/2} \tag{4.8}$$

Λ er en meget viktig parameter. Hvis den er svært liten relativt aktuelle lengder (f.eks. midlere partikkelavstand), så gir det god mening å betrakte systemet uten bruk av kvantemekanikk. Mere presist går at kvante → klassisk termodynamikk i denne grensen, [3, s.70, 89]. Dette er det samme krav som at de Broglie bølgelengden $\lambda = h/p$ må være liten for at klassisk mekanikk skal være gyldig.

For vekselvirkende partikler er Konfigurasjonsintegralet den kritiske størrelse. Kan det beregnes, så er problemet løst. Det er imidlertid klart at dette $D \cdot |N|$ -dimensjonale integralet bare kan beregnes for svært spesielle vekselvirkninger, som f.eks. hvis $V_N = \sum_{\gamma, n_{\gamma}} V(\vec{r}_{n_{\gamma}})$. Dette siste er essensielt ideell gass tilfellet.

Middelverdier til posisjonsavhengige størrelser beregnes ved:

$$\langle A(q) \rangle = \frac{\int dq A(q) e^{-\beta V(q)}}{Q_N} \tag{4.9}$$

4.1.1 Noen termodynamiske størrelser

Et eksempel på hvor sentral partisjonsfunksjonen er finnes ved å beregne:

$$\left(\frac{\partial \ln Z_N}{\partial \beta} \right)_{V,N} \stackrel{(4.4)}{=} - \frac{\int dpdq e^{-\beta H} H}{\int dpdq e^{-\beta H}} = \langle H \rangle = U \quad (4.10)$$

Altså et uttrykk for den indre energi til systemet. Deriverer man en gang til fåes:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \ln Z_N} \right)_\beta V, N \stackrel{(4.10)}{=} \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2 = \langle (H - \langle H \rangle)^2 \rangle \quad (4.11)$$

D.v.s. energifluktuasjonen. Konstant volum varmekapasiteten definert ved:³

$$C_V \stackrel{def}{=} \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{V,N} = \left(\frac{\partial U}{\partial \beta} \right)_{V,N} \cdot \left(\frac{\partial \beta}{\partial T} \right)_{V,N} = -\beta^2 \left(\frac{\partial U}{\partial \beta} \right)_{V,N} \quad (4.12)$$

Av likning (4.11) følger så:

$$C_V = \beta^2 \langle (H - \langle H \rangle)^2 \rangle = -\beta^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \ln Z_N} \right)_\beta V, N \quad (4.13)$$

En enklere variant er:

$$U = NT - \left(\frac{\partial \ln Q_N}{\partial \beta} \right)_V \quad (4.14)$$

4.2 Det Store Kanoniske Ensemble

I mange tilfeller er det praktisk (eller nødvendig!) å se på system hvor antall partikler ikke er gitt. Da fåes Den Store Kanoniske fordeling:

$$n(p, q, N) = \frac{e^{\beta(-pV + \mu N - H_N(p, q))}}{h^{N|D} N!} \quad (4.15)$$

Det nye her er det kjemiske potensial μ_γ , som antas gitt for de respektive partikkeltyper, gjerne uendelig mange typer. Videre at trykket p kommer inn som en normeringskonstant i stedet for Helmholtz frie energi F .

³Merk at jeg lar k_B inngå i T slik at T måles i energienheter

Termodynamiske størrelser defineres nå via midlingen:

$$\langle A(p, q, N) \rangle \stackrel{def}{=} \sum_N \int dp dq n(p, q, N) A(p, q, N) \quad (4.16)$$

Her må man merke seg at $dpdq$ avhenger av N . Normeringskravet $\langle 1 \rangle = 1$ gir partisjonsfunksjonen:

$$\Xi(\beta, z) \stackrel{def}{=} e^{\beta p V} \stackrel{(4.13)}{=} \sum_N \frac{z^N}{N!} Q_N \quad (4.17)$$

hvor fugasiteten z er innført:

$$z_\gamma = \frac{e^{\beta \mu_\gamma}}{\Lambda_\gamma^D} \quad (4.18)$$

4.2.1 Termodynamiske størrelser

Midlere vekselvirkningsenergi kan nå finnes ved:

$$\left(\frac{\partial \ln \Xi}{\partial \beta} \right)_z \stackrel{(4.17)}{=} \langle -V(p, q, N) \rangle \quad (4.19)$$

Den indre energi er dermed gitt ved:

$$U = \frac{D}{2} NT - \left(\frac{\partial p V \beta}{\partial \beta} \right)_z \quad (4.20)$$

hvor det første leddet er det kinetiske bidraget, d.v.s. ideell gass bidraget. Indre energi per volum:

$$u = \frac{D}{2} n T - \left(\frac{\partial p \beta}{\partial \beta} \right)_z \quad (4.21)$$

Derivasjon med hensyn på μ gir betingelsesligning mellom $z(\mu)$ og n :

$$\left(\frac{\partial \ln \Xi}{\partial \mu} \right)_\beta \stackrel{(4.17)}{=} \beta \langle N \rangle \quad (4.22)$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \mu} \right)_{\beta} \stackrel{(4.17)}{=} n \quad (4.23)$$

Eller enda enklere fra likning (4.17):

$$N = z \left(\frac{\partial pV\beta}{\partial z} \right)_{\beta} \quad (4.24)$$

Fluktuasjoner i N finnes som fluktuasjonene i H i det Kanoniske Ensemble ved nok en derivasjon:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \ln \Xi} \right)_{\mu} \beta = \frac{\left(\frac{\partial^2}{\partial \Xi} \right)_{\mu} \beta}{\Xi} - \left(\frac{\left(\frac{\partial \Xi}{\partial \mu} \right)_{\beta}}{\Xi} \right)^2 = \beta^2 \langle (N - \langle N \rangle)^2 \rangle \quad (4.25)$$

Tilsvarende rollen til varmekapasiteten svarer nå kompressibiliteten definert ved:

$$\kappa \stackrel{def}{=} -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_{T,V} = \frac{n}{\left(\frac{\partial p}{\partial n} \right)_{\beta,V}} = \frac{\beta}{V} \langle (N - \langle N \rangle)^2 \rangle \quad (4.26)$$

Tilstandsligningen $p = p(n, \beta)$ finnes ved å eliminere z til fordel for n . Det samme gjelder for energien og varmekapasiteten.

4.3 Termodynamiske relasjoner

Alle termodynamiske størrelser som vil bli benyttet her kan utledes fra:

$$F^* = U^* - T^*S^* \quad (4.27)$$

$$G^* = U^* + p^*V^* - T^*S^* = \mu^*N = \sum_{\gamma} \mu_{\gamma}^*N_{\gamma} \quad (4.28)$$

$$dU^* = T^*dS^* - p^*dV^* + \mu^*dN \quad (4.29)$$

Her har jeg valgt og la entropien S være dimensjonsløs, mens temperaturen måles i energiheter (som i resten av prosjektet).

De to første likningene kan tas som definisjoner. Den siste er et uttrykk for energibevaring. Størrelsene som inngår gjøres lett dimensjonsløse ved innføring av en energienhet E^* og en lengdeenhet L^* :

$$F^* = E^* F \quad (4.30)$$

$$U^* = E^* U \quad (4.31)$$

$$G^* = E^* G \quad (4.32)$$

$$\mu^* = E^* \mu \quad (4.33)$$

$$T^* = E^* T \quad (4.34)$$

$$V^* = L^D V \quad (4.35)$$

$$p^* = E^* L^{-D} p \quad (4.36)$$

Innføring av likning (4.30) i likning (4.27) samt differensiering gir:

$$dF = dU - TdS - SdT \quad (4.37)$$

$$dG = dU - TdS - SdT + pdV + Vdp \quad (4.38)$$

Av likning (4.29) følger:

$$T = \left(\frac{\partial U}{\partial S} \right)_{V,N} \quad (4.39)$$

Temperaturen kan faktisk defineres ved ovenstående [2, s.41]. Videre:

$$p = - \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_{S,N} \quad (4.40)$$

$$\mu_\gamma = \left(\frac{\partial U}{\partial N_\gamma} \right)_{S,V} \quad (4.41)$$

Og slik kan man fortsette... Tilsvarende fra likning (4.37) kombinert med likning (4.38):

$$dG = \mu dN + N d\mu = dF + pdV + Vdp \quad (4.42)$$

$$\mu_\gamma = \left(\frac{\partial F}{\partial N_\gamma} \right)_{\mu,V,p} \quad (4.43)$$

Kombineres likning (4.29) med likning (4.37) oppnås:

$$dF = -pdV + \mu dN - SdT \quad (4.44)$$

$$p = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{N,T} = T \left(\frac{\partial \ln Z_N}{\partial V} \right)_{N,T} = T \left(\frac{\partial \ln Q_N}{\partial V} \right)_{N,T} \quad (4.45)$$

$$\mu_\gamma = \left(\frac{\partial F}{\partial N_\gamma} \right)_{V,T} \quad (4.46)$$

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V,N} \quad (4.47)$$

Tilslutt ved likning (4.29) og likning (4.38):

$$dG = \mu dN + N d\mu = \mu dN - SdT + Vdp \quad (4.48)$$

$$N = V \left(\frac{\partial p}{\partial \mu} \right)_T \quad (4.49)$$

$$S = -N \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_p = V \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\mu \quad (4.50)$$

Et uttrykk for energien kan finnes ved:

$$U = F + TS = F - T \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V,N} = \left(\frac{\partial \beta F}{\partial \beta} \right)_{V,N} \quad (4.51)$$

som tilsvarer tidligere resultat. I Det Store Kanoniske kan en benytte:

$$U = \mu N - pV + TS = \mu N + (T \frac{\partial}{\partial T} - 1)_\mu pV \quad (4.52)$$

Hvis en antar at $pV\beta = \ln \Xi(\beta, V, \mu)$ er gitt, så har en nå to alternative ruter i tillegg til den førstnevnte for å finne U. En kan benytte overstående eller gå veien om F.

Del III

Diverse angrepsmåter

Kapittel 5

To-dimensjonalt H-atom

Skal se på et system bestående av en positiv og en negativ partikkel, d.v.s. det symmetriske $N = 2$ tilfellet, i to dimensjoner. Det er noe uvanlig, i hvert fall klassisk, å benytte statistisk mekanikk på et to legemeproblem. Her gir imidlertid dette enkle tilfellet relativt mye informasjon.

Den potensielle energien er:

$$V(r) = \ln \frac{r}{L} \quad (5.1)$$

som gir konfigurasjonsintegralet:

$$Q_2 = V \int_0^\infty e^{-\beta \ln \frac{r}{L}} 2\pi r dr = VV_L \int_{\frac{0}{L}}^{\frac{\infty}{L}} u^{1-\beta} du \quad (5.2)$$

(5.3)

$$= VV_L \left[\frac{u^{2-\beta}}{2-\beta} \right]_{\frac{0}{L}}^{\frac{\infty}{L}}, \beta \neq 2 \quad (5.4)$$

$$= VV_L [\ln u]_{\frac{0}{L}}^{\frac{\infty}{L}}, \beta = 2 \quad (5.5)$$

Kan med fordel settes opp mot det tredimensjonale tilfellet:

$$Q_2^{D=3} = V \int_V e^{\beta \frac{1}{r}} d^3 r \quad (5.6)$$

I tre dimensjoner vil integranden gå mot 1 ved $r \rightarrow \infty$. Dette fører til at konfigurasjonsintegralet divergerer som V^2 når den termodynamiske grensen skal tas. Her blir forholdene noe mere spesielle i $D = 2$ dimensjoner, som vi skal se.

Denne effekten kommer fram på akkurat samme måte når en ser på systemet kvantemekanisk, j.m.f. [35]. Dette er som det bør være da det er en effekt som skjer på store avstander. I den kvantemekaniske versjonen møter en (de penne) Riemann Zeta-funksjonene. For de som er opptatt av tall annbefales [23, 22].

5.1 Høye temperaturer

Antar at $\beta < 2$ og ser at øvre grense i likning (5.2) da må erstattes av R for at integralet skal bli endelig. Dette tilsvarer at systemet er plassert i en kule med volum $V = 2\pi R^2$. Finner da:

$$Q_2 = VV_L \frac{(V/V_L)^{(2-\beta)/2}}{2 - \beta} \quad (5.7)$$

Tilstandslikningen finnes nå enkelt ved:

$$\left(\frac{\partial \ln Q_2}{\partial V} \right)_\beta = \frac{\partial}{\partial V} \left(\ln V + \frac{1}{2}(2 - \beta) \ln V \right) = (4 - \beta)/(2V) = p\beta \quad (5.8)$$

$$p = \frac{2}{V}(T - 1/4), T > 1/2 \quad (5.9)$$

Energien og varmekapasiteten følger :

$$\left(\frac{\partial \ln Q_2}{\partial \beta} \right)_V = \frac{\partial}{\partial \beta} ((2 - \beta) \ln(R/L) - \ln(2 - \beta)) = -\ln(R/L) + \frac{1}{2 - \beta} \quad (5.10)$$

$$U = 2T - \left(\frac{\partial \ln Q_2}{\partial \beta} \right)_V = 2T + \ln(R/L) - \frac{1}{2 - \beta} \quad (5.11)$$

$$C_V = -\beta^2 \left(\frac{\partial U}{\partial \beta} \right)_V = 1 - \left(\frac{\beta}{2 - \beta} \right)^2 \quad (5.12)$$

5.2 Lave temperaturer

Ser nå på $\beta > 2$. I likning (5.1) ser en at nedre grense må erstattes av en hard kjerne parameter a for å få konvergens. Øvre grense kan fortsatt være ∞ , men en må ha i minne at det ligger volumavhengighet i denne grensen, så det er tryggest å beholde en R der. Finner nå:

$$\ln Q_2^a = \ln V_L + \ln V - \ln(\beta - 2) + (2 - \beta) \ln \frac{a}{L} \quad (5.13)$$

$$+ \ln(1 - (v/V)^{(\beta-2)/2}), v = \pi a^2 \quad (5.14)$$

Det siste ledet skyldes at øvre grense ble beholdt endelig. Ser at bidraget forsvinner enten ved $a \rightarrow 0$ eller $R \rightarrow \infty$.

Varmekapasitet finnes som over:

$$C_V = 2 - \left(\frac{\beta}{\beta - 2} \right)^2 - \left(\frac{1}{2} \beta \ln(v/V) \right)^2 \frac{(v/V)^{1-\beta/2}}{((v/V)^{1-\beta/2} - 1)^2}, \quad \beta > 2 \quad (5.15)$$

Legger merke til at divergensen ved $\beta = 2$ er som før (fra samme ledd som før!).

5.2.1 Momenter

Hvis det skal gi mening å splitte et mangepartikkelpproblem opp i flere (tilnærmet) uavhengige topartikkelpproblem er det klart at momentene:

$$\langle r^k \rangle = \frac{V \int r^k e^{-\beta V(q)} dq}{Q_2} \quad (5.16)$$

$$(5.17)$$

$$= \frac{\beta-2}{\beta-(k+2)} a^k, \quad \beta > k + 2 = \infty, \quad 2 < \beta \leq k + 2 \quad (5.18)$$

må komme inn i vurderingen. Et parr hvor $\langle r^k \rangle < \infty$ kan døpes til å hete en k -te ordens partikkel. Jo høyere orden en slik ”partikkel” har jo bedre mening gir det å behandle parret som en partikkel.

For å se på effekten av at det egentlig dreier seg om et mangepartikkelpproblem må en se på effekten av vekselvirkninger mellom parrene. Her kommer det elektrostatiske dipolmomentet inn i bildet og det er fristende å påstå at når $\langle r \rangle \propto a \rightarrow 0$ så gir dipolvekselvirkningen mellom parrene ikke noe bidrag til termodynamiske størrelser. Det er enda mere fristende (men ikke så rimelig !) å påstå at når $\langle r^k \rangle \propto a$ så kan $k+1$ -polmomentet neglisjeres.¹

Hvis det overstående er riktig ,så bestemmes potensen det effektive potensialet skal avta med av ”partikkelen” orden. Men tettheten kommer også inn i bildet. Denne bestemmer hvilken lengdeskala vekselvirkningen skjer på.

¹Dette må nok regnes som en (kanskje litt for) intuitiv antagelse.

Kapittel 6

Hauge og Hemmers Resultat

6.1 Konfigurasjonsintegralet

Ved rent logaritmisk potensial kan den eksakte tilstandslikningen lett finnes. Dette ble gjort allerede i 1971 av Hauge og Hemmer,[30]. Det følgende er en gjentagelse av dette.

La som før den potensielle energien til partikkelsystemet være:

$$V_N = \sum_{i < j}^N -e_i e_j \ln \frac{r_{ij}}{L} \quad (6.1)$$

Konfigurasjonsintegralet blir, med en skalering av volumet:

$$Q_N(\lambda^2 V, \beta) = \int_{(\lambda^2 V)^N} dq \prod_{i < j}^N \left(\frac{r_{ij}}{L} \right)^{e_i e_j \beta} \quad (6.2)$$

Bytter variable slik at:

$$\pi r_i^2 < \lambda^2 V \Leftrightarrow \pi \tilde{r}_i^2 < V \quad (6.3)$$

Som oppnåes ved:

$$q_i = \lambda \tilde{q}_i \quad (6.4)$$

Ved variabelskifte i likning (6.4):

$$Q_N(\lambda^2 V, \beta) = \int_{V^N} d\tilde{q} \lambda^{2N} \prod_{i < j} \left(\lambda \frac{\tilde{r}_{ij}}{L} \right)^{e_i e_j \beta} \quad (6.5)$$

$$= Q_N(V, \beta) \cdot \lambda^{2N + \sum_{i < j} e_i e_j \beta} \quad (6.6)$$

Benytter så den vanlige omskrivning:

$$\sum_{i < j} e_i e_j \beta = \sum_{i,j} e_i e_j \beta / 2 - \sum_{i=j} e_i e_j \beta / 2 \quad (6.7)$$

$$= (\sum_i e_i)^2 \beta / 2 - \sum_i e_i^2 / 2 \quad (6.8)$$

Ved et nøytralt system vil det første ledet være lik 0. For å beholde det generelle tilfellet litt til defineres ladningsoverskuddet N_+ :

$$\sum_{i=1}^N e_i \stackrel{def}{=} N_+ \quad (6.9)$$

Det andre ledet i likning (6.7) vil alltid være av betydning. Har tidligere definert de dimensjonsløse ladningene slik at midlere ladningskvadrat er lik en¹. D.v.s.:

$$\sum_i e_i^2 \stackrel{def}{=} N e^2 = N \quad (6.10)$$

Velges nå:

$$\lambda^2 V = V_0 \quad (6.11)$$

hvor V_0 er uavhengig av V finnes:

$$Q_N(V, \beta) = Q_N(V_0, \beta) \cdot (V/V_0)^{N - \beta(N - N_+^2)/4} \quad (6.12)$$

Og dermed er de volumunderiverte størrelsene i termodynamikken bestemt, forutsatt at konfigurasjonsintegralet er definert ved den aktuelle temperatur.

Glemmes foreløpig forutsetningen over, kan tilstandsligningen finnes ved:

$$p = T \left(\frac{\partial \ln Q_N}{\partial V} \right)_{N,T} = T(N - \beta(N - N_+^2)/4)/V \quad (6.13)$$

$$= n(T - 1/4) + N_+^2/(4V) \quad (6.14)$$

¹ e^2 ville her uansett fulgt N i beregningene. Effekten av variasjon i styrken på vekselvirkningen er dekket i variasjon av den dimensjonsløse temperaturen, $T \propto T^*/e^{*2}$.

6.2 Ladningsoverskudd per overflate

Det siste leddet i likning (6.13) gir også litt informasjon om ikke nøytrale system. La σ være forholdet mellom overskuddsladningen og systemets overflate (kubisk makroskopisk volum):

$$\sigma = N_+ / (V^{(D-1)/D}) = N_+ V^{-1/2} \quad (6.15)$$

Se så på den termodynamiske grensen $N, V \rightarrow \infty$ i tre tilfeller:

$$\sigma \rightarrow 0 \Rightarrow p \rightarrow n(T - 1/4) \quad (6.16)$$

$$\sigma \rightarrow Konstant \Rightarrow p \rightarrow n(T - 1/4) + \sigma^2/4 \quad (6.17)$$

$$\sigma \rightarrow \pm\infty \Rightarrow p \rightarrow \infty \quad (6.18)$$

Det første tilfellet gir det nøytrale resultatet. Det andre et konstant trykk bidrag proporsjonalt med kvadratet av overskuddsladning per overflate. Og det siste et uendelig trykk, et ufysisk tilfelle.

Et intuitivt bilde er godt å støtte seg til: Ved likevekt vil ladningsoverskuddet være konsentrert ut mot randen, et volum i det indre vil være nøytralt. En slik ladningskonfigurasjon følger nødvendigvis ut i fra kravet om minimalisering av energien, hvis en ser bort i fra entropiefekter. Anta, for å være konkret, at volumet er en D-dimensjonal kule. Overskuddsladning ut mot randen vil da ikke gi noe feltbidrag i det nøytrale indre. Gassen i det indre vil være en fri nøytral gass. Det totale trykket kan da tenkes sammensatt av to bidrag. Ett fra det nøytrale indre og ett fra kreftene som det ladete skallet virker på seg selv med (kraft=motkraft). Dette bildet stemmer med det overstående resultatet i $D = 2$ dimensjoner:

$$p_{skall} = Kraft \cdot 1/Overflate \propto (\sigma R)^2 / R \cdot 1/R \propto \sigma^2 \quad (6.19)$$

Fysikken i det indre av gassen vil være som for en nøytral gass i dette forenklede bildet. Problemene med en nøytral gass er uansett store nok til at jeg (stortsett) holder meg til dette tilfellet i resten av prosjektet.

6.3 Kollaps?

Ligning likning (6.13), i det nøytrale tilfellet, sees å gi negativt trykk ved $T < 1/4$. Negativt trykk tilsvarer at man må påvirke gassen med krefter for å hindre at den kollapser, i motsetning til å påvirke den med krefter for å hindre at den ekspanderer (gassen i en boks). Ser man på systemet slik det er definert (i en boks), gir ikke negativt trykk mening. Konfigurasjonsintegralet må under lupen.

Ved kollaps er det små partikkelavstander som er aktuelle. Altså må det være potensialets oppførsel ved små avstander som er kritisk. Se på det enkleste tilfellet, som er et system med en positiv og en negativ partikkel. Da er:

$$Q_2(V, \beta) = V \int_0^L e^{-\beta(-)^2 \ln r} 2\pi r dr \propto \int_0^L r^{1-\beta} dr \quad (6.20)$$

Ved $\beta \geq 2$ vil integralet bli divergent (uendelig stort) p.g.a. den nedre grensen. Da er systemet ikke lenger veldefinert. Et $\beta < 2$ fåes ingen problem. En behandling av systemet for temperaturer $< 1/2$ innenfor de vanlige rammer krever en modifisering av potensialets oppførsel ved små avstander. Innføring av en hard kjerne er den mest brutale varianten.

Det er klart at problemet i likning (6.20) også gjelder for høyere N . Konfigurasjonsintegralet vil også der måtte integrere over konfigurasjoner hvor to motsatt ladete partikler kommer tilfeldig nær hverandre.

Konklusjonen er, som hos Hauge og Hemmer, at tilstandslikningen for et nøytralt system blir:

$$p = n(T - 1/4), \quad T > 1/2 \quad (6.21)$$

Et mere rigorøst bevis for temperaturer helt opp til $T = 1/2$ savnes. For temperaturer opp til $1/6$ henviser jeg til [31].

6.4 Intuitiv behandling av tilfellet $T \leq 1/2$

Det essensielle her er igjen hentet fra Hauge og Hemmer,[30]. Synes allikevel en gjennomgang, med mine ord, er berettiget.

Anta at systemet er kommet til likevekt med T like over $1/2$. Senk så² temperaturen ned til $1/2$. Ved kollaps vil ett par dannes først³ og gi et $-\infty = -e_1 e_2 \ln 0$ bidrag til energien. Dette parret kan (kritisk !) sees på som en ny nøytral partikkel med dobbel masse. Det nye systemet kan så behandles ved å se bort fra det ∞ -energibidraget. Systemet er $N - 2$ ladete partikler og 1 nøytral partikkel. De ladete partiklene kan ikke påvirkes av den nøytrale

²Legg merke til at argumentet krever at en ser på en tidsutvikling av systemet. Likevektslæren forlates midlertidig.

³Om noen dannes likt er dette uvesentlig her. Multiplikasjon av ∞ med ett heltall er ikke spennende.

partikkelen da den er et punkt. Altså dannes det et nytt parr og slik fortsetter det. Ved likevekt (etter uendelig lang tid) gjenstår en med $N/2$ nøytrale partikler, tilsynelatende en nøytral gass. Tilstandsligningen er da:

$$p = nT/2, \quad T \leq 1/2 \quad (6.22)$$

Svakheten her er opplagt. Tenker en seg at en ser på en utvikling mot likevekt ved å gå fra lave temperaturer, så kan likning (6.21) vanskelig oppnås. De nøytrale partiklene har jo ingen indre struktur, en har mistet det vesentlige. I prinsipp kan dette problemet unngås ved å beholde en hard kjerne i beregningene, men da synes igjen problemene å tårne seg opp. I en kvantemekanisk behandling av systemet forsvinner dette problemet, \hbar spiller effektivt rollen som en hard kjerne parameter. Dette kan sies å være den prinsipielt riktige litenhetsparameteren. Den er ikke ”tatt ut av luften”, men er inneholdt i en antatt riktigere formulering av problemet.

Fysikken for $T < 1/2$ har blitt og blir for tiden studert av mange, se f.eks. [29, 31, 33, 34, 35, 36, 37]. Overgangen ved $T = 1/2$ blir referert til som Kosterlitz-Thouless overgangen p.g.a. deres arbeid med denne.

6.5 Nær $T = 1/2$

Fysikken nær $T = 1/2$ kan estimeres med antagelsen om parrdannelse. Da det er $(N/2)!$ mulige måter å lage parr på⁴. Multipliseres dette med bidraget til konfigurasjonsintegralet fra hver av disse konfigurasjonene fås et totalt estimat:

$$Q_N^{parr} \simeq (N/2)! \cdot \left[V \int_a^R dr 2\pi r^{1-\beta} \right]^{N/2} \quad (6.23)$$

$$= (N/2)! \cdot \left[V 2\pi \frac{R^{2-\beta} - a^{2-\beta}}{2-\beta} \right]^{N/2}, \quad \beta \neq 2 \quad (6.24)$$

$$Q_N^{parr} \simeq (N/2)! \cdot \left[V 2\pi \ln \frac{R}{a} \right]^{N/2}, \quad \beta = 2 \quad (6.25)$$

Det siste er kun interessant ved sammenligning med andre resultat. Er det overensstemmelse, så er parrdannelsen understøttet. R er her en antatt maksimal avstand mellom de to partiklene i et parr.

Det er betryggende (søvndyssende?) å se at den ventede tilstandsligning finnes:

⁴Ta en positiv partikel. Den har da $N/2$ mulige partnere. For hver av disse vil den neste positive partikkelen ha $N/2 - 1$ mulige partnere osv...

$$p = T \left(\frac{\partial \ln Q_N^{parr}}{\partial V} \right)_{N,T} \stackrel{(6.23)}{=} Tn/2 \quad (6.26)$$

Det er antagelsen om at R er uavhengig av V som gjorde utslaget. Hvis man hadde satt $R \propto \sqrt{V}$, ville en fått tilstandslikningen $p = n(T - 1/4)$ som før.⁵

Noe mere spennende er det å estimere varmekapasiteten:

$$c_V \simeq n + V^{-1} \beta^2 \left(\frac{\partial^2 \ln Q_N^{parr}}{\partial \beta^2} \right)_{V,N} = n + \frac{n}{2} \cdot \beta^2 \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \left(\ln \frac{R^{2-\beta} - a^{2-\beta}}{2-\beta} \right) \quad (6.27)$$

$$\simeq n + \frac{n}{2} \cdot \beta^2 \frac{\partial}{\partial \beta} ((2-\beta)^{-1}) = n + \frac{n}{2} \cdot \beta^2 (2-\beta)^{-2} \quad (6.28)$$

$$= n + \frac{n}{2} \cdot ((2-\beta)/\beta)^{-2} = n + \frac{n}{2} \cdot (2T-1)^{-2} \quad (6.29)$$

⁵For tilstandslikningen her ville en også kunne ta grensen $a \rightarrow 0$ smertefritt, men konfigurasjonsintegralet ville divergere ...

Kapittel 7

Eksakte resultat

7.1 Formen til Den Store Kanoniske Partisjonsfunksjon

Vil gjerne vise at:

$$p\beta = d(\beta) \cdot z^{\frac{1}{1-\beta/4}}, \quad \beta < 2, N_+ = 0 \quad (7.1)$$

Dette resultatet er bevist av Frölich,[?, Theorem 4.7,s.257]. Kravet på $d(\beta)$ er at den er positiv og endelig for $\beta < 2$.¹ En transformasjon over på Sine-Gordon teorien (se senere kapittel!) er hans utgangspunkt.

Resultatet for konfigurasjonsintegralet får følgende konsekvens for Helmolz frie energi:

$$e^{-\beta F(V, \beta, N)} = \frac{Q_N(V, \beta)}{\Lambda^{2N} N!} = e^{-\beta F(V_0, \beta, N)} \cdot (V/V_0)^{N - \beta(N - N_+^2)/4} \quad (7.2)$$

$$F(V, T, N) = F(V_0, T, N) - \left(NT - \frac{1}{4}(N - N_+^2)\right) \ln(V/V_0) \quad (7.3)$$

Det kjemiske potensialet μ er dermed:

$$\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N} \right)_{V,T} = \left(\frac{\partial F_0}{\partial N} \right)_{V,T} - \left[T - \frac{1}{4} \left(1 - \left(\frac{\partial N_+^2}{\partial N} \right)_{V,T} \right) \right] \ln(V/V_0) \quad (7.4)$$

Ved å benytte tilstandslikningen, samt det ikke urimelige kravet på systemet at $r_+ = N_+/N = konstant \in [-1, 1]$, så finnes:

¹Frölich bruker symbolet $\alpha (= \beta/2)$.

$$V/V_0 = \exp \left[\frac{\left(\frac{\partial F_0}{\partial N} \right)_{V_0, T} - \mu}{T - (1 - r_+^2 2N)/4} \right] = \frac{1}{p} N(T - 1/4)/V_0 \quad (7.5)$$

$$p\beta = d(\beta; V_0) \cdot z^{\frac{1}{1-\beta(1-r_+^2 2N)/4}} \quad (7.6)$$

hvor det er benyttet at $z = e^{\beta\mu}/\Lambda^2$. Det kan virke som om $\left(\frac{\partial F_0}{\partial N} \right)_{V,T}$ skulle føre til at d også avhenger av z via $N(z)$, men dette kan ikke være sant. Dette innsees ved å finne tilstandslikningen fra likning (7.6) :

$$n = z \frac{\partial}{\partial z} (p\beta) = \frac{p\beta}{1 - \beta(1 - r_+^2 2N)/4} + z \frac{\partial}{\partial z} (d(\beta; V_0)) \cdot z^{\frac{1}{1-\beta(1-r_+^2 2N)/4}} \quad (7.7)$$

For konsistens med tidligere funnet tilstandslikning må det siste leddet være 0.

Dermed er en litt mere generell likning enn den søkte likning (7.1) funnet.

d 's avhengighet av en vilkårlig valgt parameter V_0 er verdt å merke seg. I en senere utledning av samme formel fra en funksjonalintegral formulering vil d inneholde konstanten ϵ som regulariserer potensialets oppførsel ved store avstander.

Fra den nevnte funksjonalintegralformuleringen følger mere informasjon om d . En rekkeutvikling der indikerer at:

$$d(\beta) = g(\beta) \cdot h(\beta)^{\frac{1}{1-\beta/4}} \quad (7.8)$$

$$g(\beta) = \sum_{k=0}^{\infty} b_k \beta^{k+r_g} \quad (7.9)$$

$$h(\beta) = \beta^{r_h} \quad (7.10)$$

Det er ikke mere generelt å la h også være en rekke. Dette vises enkelt ved å anta at h må utvikles som en rekke. Noen linjers omskrivning viser da at den gitte form er generell nok.

7.2 Energien og Varmekapasiteten

Ved å anta likning (7.1) finnes energien pr. volum:

$$u = nT - \left(\frac{\partial p\beta}{\partial \beta} \right)_z \quad (7.11)$$

$$\left(\frac{\partial p\beta}{\partial \beta} \right)_z = d' z^{\frac{1}{1-\beta/4}} + dz^{\frac{1}{1-\beta/4}} \ln z^{\frac{1/4}{(1-\beta/4)^2}} = \frac{d'}{d} p\beta + p\beta \ln \frac{p\beta}{d} \frac{1/4}{1-\beta/4} \quad (7.12)$$

$$= n \left[\frac{d'}{d} (1 - \beta/4) + \frac{1}{4} \ln \frac{n(1-\beta/4)}{d} \right] \quad (7.13)$$

$$u = n \left[\beta^{-1} - \frac{d'}{d} (1 - \beta/4) - \frac{1}{4} \ln \frac{n(1-\beta/4)}{d} \right] \quad (7.14)$$

Varmekapasiteten finnes ved:

$$c_V = -\beta^2 \left(\frac{\partial u}{\partial \beta} \right)_n \quad (7.15)$$

$$c_V = -\beta^2 n \left[-\beta^{-2} - \left(\frac{d'}{d} \right)' (1 - \beta/4) - \frac{d'}{d} (-1/4) + \frac{1}{4} \frac{d''}{d} + \frac{1}{16} \frac{1}{(1-\beta/4)} \right] \quad (7.16)$$

$$= n + \beta^2 n \left[\left(\frac{d'}{d} \right)' (1 - \beta/4) - \frac{1}{2} \frac{d''}{d} - \frac{1}{16} \frac{1}{(1-\beta/4)} \right] \quad (7.17)$$

Det første leddet er ideell gass resultatet (i 2 dimensjoner). Resten skyldes vekselvirkningen. I likning (7.16) kan en også innsette:

$$\left(\frac{d'}{d} \right)' = \frac{d''}{d} - \left(\frac{d'}{d} \right)^2 \quad (7.18)$$

For å regne videre med formen i likning (7.8) trenges:

$$d'(\beta) = g'(\beta) \cdot h(\beta)^{\frac{1}{1-\beta/4}} + g(\beta) \cdot h(\beta)^{\frac{1}{1-\beta/4}} \cdot \left(\frac{\ln h}{1-\beta/4} \right)' \quad (7.19)$$

$$= g'(\beta) \cdot h(\beta)^{\frac{1}{1-\beta/4}} + g(\beta) \cdot h(\beta)^{\frac{1}{1-\beta/4}} \cdot \left[\frac{h'}{h} \frac{1}{1-\beta/4} + \ln h \frac{1/4}{(1-\beta/4)^2} \right] \quad (7.20)$$

$$d'/d = \frac{g'}{g} + \frac{h'}{h} \cdot \frac{1}{1 - \beta/4} + \ln h \frac{1/4}{(1 - \beta/4)^2} \quad (7.21)$$

$$\frac{1}{4} \ln d = \frac{1}{4} (\ln g + \frac{1}{1-\beta/4} \ln h) \quad (7.22)$$

Innsettes overstående i likning (7.14) for energien finnes:

$$u = n[\beta^{-1} - (g'/g + \frac{h'}{h} \cdot \frac{1}{1-\beta/4} + \frac{1/4}{(1-\beta/4)^2} \ln h)(1 - \beta/4)] \quad (7.23)$$

$$- \frac{1}{4} \ln(n(1 - \beta/4)) + \frac{1}{4} (\ln g + \frac{1}{1-\beta/4} \ln h)] \quad (7.24)$$

$$= n \left[\beta^{-1} - \frac{g'}{g}(1 - \beta/4) + \frac{1}{4} \ln g - \frac{1}{4} \ln n(1 - \beta/4) - \frac{h'}{h} \right] \quad (7.25)$$

Hyggelig at den antatte fasongen ikke ga mer enn ett ekstra ledd i forhold til likning (7.14). Dette ledet er særdeles enkelt:

$$\frac{h'}{h} = (r_h \beta^{r_h-1}) / \beta^{r_h} = r_h / \beta \quad (7.26)$$

I utgangspunktet virket dette resultatet urovekkende på meg. Ledet gir jo et bidrag av samme størrelsesorden som det fra ideell gass! På den annen side er det klart at ideell gass resultatet må være det riktige resultatet til ledende orden. Dette gir kravet om at bidraget likning (7.26) må slåes ut av et bidrag fra g . Det er noksåklart at det må være det andre ledet i likning (7.23), g'/g , som gjør nytten. Et krav på g !

Ved derivasjon av likning (7.23) og sammenlikning med likning (7.16) finnes:

$$c_V = n + \beta^2 n \left[\left(\frac{d'}{d} \right)' (1 - \beta/4) - \frac{1}{2} \frac{d'}{d} - \frac{1}{16} \cdot \frac{1}{1 - \beta/4} + \left(\frac{h'}{h} \right)' \right] \quad (7.27)$$

Likningene ovenfor vil være til stor nytte i beregninger av forholdene for $T > 1/2$. Under den kritiske temperaturen blir livet vanskeligere fordi tilstandslikningen ikke er kjent.

Kapittel 8

Debye-Hückel Tilnærmelsen

8.1 Debye-Hückel tilnærmelsen

Argumentasjonen her er hentet fra Landau og Lifshitz innholdsrike bok [?, s.239-]. For Coulombsystemer er den vanlige fugasitetsutviklingen ikke mulig. Dette fordi integralene som vil inngå i koeffisientene vil divergere for små avstander mellom motsatt ladete partikler. La som før N_γ være antall partikler av type γ , hvor γ angir ladningen, f.eks. $\gamma \in \{-, +\}$. Ladningsnøytralitet krever:

$$\sum_\gamma \gamma N_\gamma = 0 \quad (8.1)$$

Skal anta i det følgende at gasstilstanden ikke avviker mye fra ideell gass. Dette krever at (variasjon) i potensiell energi er mye mindre enn den kinetiske energi¹. Da avstanden mellom partiklene er $\propto (V/N)^{\frac{1}{d}}$ fåes:

$$T \gg \ln\left(\frac{V}{N}\right)^{\frac{1}{2}} \Rightarrow \frac{V}{N} \ll e^{2T} \quad (8.2)$$

Det er verdt å sammenlikne med tilsvarende uttrykk i 3. dimensjoner:

$$\frac{N}{V} \ll T^3 \quad (8.3)$$

Ved fiksert tetthet sees at man i begge tilfeller må ha stor T for å få oppfylt kravene. Derimot vil man ved fiksert T få krav om at tettheten er stor i to dimensjoner. Dette rimer dårlig med intuisjonen og kommer av divergensen til det logaritmiske potensial i to dimensjoner. Må derfor understreke at en klassisk beskrivelse kun er gyldig ved:

¹Konstanten L i potensialet tvinger en til ettertanke her.

$$\frac{N}{V} \ll \frac{1}{\Lambda^d} = \prod_{\gamma} \left(\frac{2\pi m_{\gamma} k_B T}{h^2} \right)^{\frac{dN_{\gamma}}{2N}} \quad (8.4)$$

hvor Λ er den termiske de Broglie bølgelengden.

Hvis partiklene var uniformert fordelt, ville den midlere vekselvirkningsenergi være null da gassen er nøytral. Korreksjonen kommer derfor av partikkelenes posisjonens avvik fra en slik fordeling. Korrelasjoner mellom partiklenes posisjoner gir derfor opphav til et bidrag som hensiktsmessig kan kalles korrelasjon korreksjoner. Nevner dette fordi en systematisk forbedring av resultatet her kan oppnås ved bruk av de såkalte korrelasjonsfunksjonene. Resultatet fra Debye-Hückel tilnærmelsen i 3. dimensjoner er identisk med tilsvarende resultat ved bare å ta hensyn til pakk korrelasjonsfunksjonen [9, s.245].

Den potensielle energi p.g.a. vekselvirkning vil være:

$$\Delta E = \frac{1}{2} \sum_{\gamma} \gamma N_{\gamma} \Phi_{\gamma} \quad (8.5)$$

hvor $\gamma \Phi_{\gamma}$ er den potensielle energien til en ladning av type γ p.g.a. vekselvirkning med de andre partiklene. Den vesentlige feilen i tilnærmelsen kommer når Φ_{γ} skal estimeres. For å estimere ϕ_{γ} kan man innføre en lokal partikkeltetthet n_{γ}^{loc} rundt en tilfeldig valgt ladning av type γ_0 . Lar Φ være potensialet når den valgte partikkelen legges i origo og antar en Boltzman fordeling:

$$n_{\gamma}^{loc} = n_{\gamma} e^{-\Phi \beta \gamma} (\gamma_0 \text{ inneholdt i } \Phi) \quad (8.6)$$

hvor kravet $n_{\gamma}^{loc} \rightarrow n_{\gamma}$ ved store avstander, r, fra senteret er oppfylt, hvis:

$$\Phi(\infty) = 0. \quad (8.7)$$

n_{γ}^{loc} er også koplet til Φ ved Poissons likning:

$$\Delta \Phi = -\frac{1}{\epsilon_0} \sum_{\gamma} \gamma n_{\gamma}^{loc} \quad (8.8)$$

pr. antagelse er $|\Phi \beta| \ll 1^2$ slik at:

$$\Delta \Phi \simeq -\frac{1}{\epsilon_0} \sum_{\gamma} \gamma n_{\gamma} (1 - \Phi \beta \gamma) \stackrel{(8.1)}{=} \sum_{\gamma} \frac{\gamma^2}{\epsilon_0} n_{\gamma} \Phi \beta \quad (8.9)$$

²Fristende å sløyfe denne tilnærmelsen. J.m.f. [29, s.1917]

$$(\Delta - \kappa^2)\Phi = 0 \quad (8.10)$$

$$\kappa^2 = \sum_{\gamma} \frac{2\pi\gamma^2}{\epsilon_0} n_{\gamma} \beta \quad (8.11)$$

$$\Phi = CK_0(\kappa r) \quad (8.12)$$

Uten ladningsnøytralitet ville man fått en inhomogen likning, som også kunne løses: $\Phi = \Phi_h + \Phi_p$ hvor Φ_p blir en konstant. C bestemmes ved at for tilstrekkelige små r må man ha:

$$\Phi \simeq -\frac{\gamma_0}{2\pi\epsilon_0} \ln \frac{r}{L} \kappa r \ll 1 \quad (8.13)$$

$$\Phi \simeq c(-\ln \frac{\kappa r}{2} e^2) \rightarrow C = \gamma_0 \frac{1}{2\pi\epsilon_0} \quad (8.14)$$

$$\Phi(r) = \gamma_0 K_0(\kappa r), \kappa^2 = \beta(2\pi)^2 \sum_{\gamma} n_{\gamma} \gamma^2 \quad (8.15)$$

Lengden $\frac{1}{\kappa}$ gir størrelsesordenen til ladningsskyen. Denne kan sammenliknes med størrelsen $\epsilon^2 + \lambda^2$ som finnes senere,j.m.f. (??) på side ???. Midlere avstand mellom ladningene må være stor i forhold til denne. Dette gir kravet:

$$\frac{N^{\frac{1}{2}}}{V} \gg \kappa \quad (8.16)$$

som er forenlig med likning (8.2).

Nå kommer det fine punktet i argumentet. Når $\kappa r \ll 1$ fåes:

$$\Phi \simeq c(-\ln \frac{\kappa r}{2} - \gamma_e) = c(-\ln r - \ln \frac{\kappa e^{\gamma_e}}{2}) \quad (8.17)$$

Det 1. ledet er Coulombfeltet fra γ_0 ionet selv. Det 2. ledet er da potensialet fra alle de andre ionene. Har dermed funnet en tilnærming for størrelser Φ_{γ} som inngår i likning (8.5) :

$$\Phi_\gamma \simeq -C \ln \frac{\kappa e^{\gamma_e}}{2} \quad (8.18)$$

$$\Delta E = -\frac{1}{4} \sum_\gamma \gamma N_\gamma \gamma \frac{1}{2\pi\epsilon_0} \ln \frac{\beta(2\pi)^2 Ne^{2\gamma_e}}{4V} \quad (8.19)$$

$$\Delta E = \frac{N}{4} \ln \frac{TVe^{-2\gamma_e}}{N\pi^2} \quad (8.20)$$

Den indre energi til systemet blir da:

$$U \simeq \frac{N}{T} + \frac{N}{4} \ln \frac{TVe^{-2\gamma_e}}{N\pi^2} \quad (8.21)$$

Som gir varmekapasiteten:

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{N,U} \simeq N + \frac{N}{4T} \quad (8.22)$$

Som en kontroll kan det sjekkes at likning (8.18) gir riktig tilstandslikning. Finner først korrekjonen til den frie energi ved likning (??) :

$$\beta \Delta F = \int_0^\beta \Delta E d\beta \quad (8.23)$$

$$\simeq -\frac{N}{4} \int_0^\beta \ln \frac{\beta N \pi^2 e^{2\gamma_e}}{V} d\beta = -\frac{N}{4} (\beta \ln \frac{N \pi^2 e^{2\gamma_e}}{V} + \beta \ln \beta - /beta) \quad (8.24)$$

$$= -\frac{N}{4} \ln \frac{\beta N \pi^2 e^{2\gamma_e-1}}{V e} \beta \quad (8.25)$$

$$(8.26)$$

$$\Delta F = -\frac{N}{4} \ln \frac{\beta N \pi^2 e^{2\gamma_e-1}}{V} \quad (8.27)$$

Finne så trykket ved likning (??) :

$$\Delta p = -\left(\frac{\partial \Delta F}{\partial V} \right)_{N,T} = -\frac{N}{4} \left(\frac{\partial \ln V}{\partial V} \right) = -\frac{N}{4V} \quad (8.28)$$

$$pV = NT - \frac{N}{4} = N(T - \frac{1}{4}) \quad (8.29)$$

som det burde være! Merk at dette er en kontroll av faktoren $\frac{1}{4}$ som inngår i likning (8.22) og likning (8.23).

Del IV

Formulering ved funksjonalintegral

Kapittel 9

Transformasjon på Sine-Gordon Teorien

Sine-Gordon teorien er en kvantefelt modell i 1 romlig- og en tidsdimensjon. Generelt kan en kvantefeltteori spesifiseres med en gitt Lagrangefunksjon, som i klassisk mekanikk. Lagrangefunksjonen for Sine-Gordon teorien er, ifølge [?, s.578]:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left(\dot{\phi}^2 - \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 \right) - (1 - \cos \phi) \quad (9.1)$$

Lagrangefunksjonen gir opphav til en differensialligning, kalt Euler-Lagrange likningen, som bestemmer de tillatte feltløsningene ϕ .

Den kjente Klein-Gordon teorien fåes ved å rekkeutvikle $\cos \phi$ med to ledd. Klein-Gordon teorien kan sees på som harmonisk oscilator tilnærmelsen til en pendel, som tilsvarende Sine-Gordon teorien.

Vanskighetene (og det som gjør den interessant !) med likning (9.1) er knyttet til det ulineære ledet $\cos \phi$.

Et av de penere resultatene i feltteori er Noethers teorem. Løst formulert sier det at til enhver kontinuerlig symmetritransformasjon svarer en bevart størrelse. Det motsatte er ikke nødvendigvis tilfelle. En kan ha bevarte størrelser som tilsynelatende ikke har en tilhørende symmetritransformasjon. Slik er det f.eks. med Sine-Gordon teorien. Den har såkalte solitonløsninger, som er bølger som kan vekselvirke med hverandre, krysse hverandre og fortsette med uendret fasong, eventuelt med et faseskift.

Da det ikke er relevant for oppgaven vil jeg ikke si mere om Sine-Gordon teorien, eller (kvante-)feltteori generelt. Må allikevel nevne at kvantiseringen av en feltteori kan gjøres på (minst?) to fundamentalt forskjellige måter. Den ene tar utgangspunkt i å la feltene bli operatorer ved å innføre kommuteringsregler. Denne metoden finnes f.eks. i [10, 7]. Den andre beholder Lagrangefunksjonen noe lenger og uttrykker fysiske størrelser ved hjelp av funksjonalintegral. Noe litteratur her er f.eks. [13, 12]. Det er denne siste måten som er knyttet til den følgende løsningsmetode for Coulombgassen.

9.1 Konfigurasjonsintegralet

Betrakter konfigurasjonsintegralet¹:

$$Q_N = \int_{V^{|N|}} dq e^{-\beta(V_N(q))} \quad (9.2)$$

Deler opp det D -dimensjonale volumet i M deler slik at integralet kan tilnærmes ved en Riemannsum². Kaller volumdelene for V_m og lar for enkelthets skyld disse få volumet $\Delta V = V/M$. Morsomt å merke seg at de kan nummereres vilkårlig, en trenger ikke spesifisere hvor i V V_m befinner seg.

Overgangen til summer skjer essensielt ved³:

$$\int_V dq_{i_\gamma} = (\int_{V_1} + \int_{V_2} + \cdots + \int_{V_M}) dq_{i_\gamma}, \quad i_\gamma = 1, \dots, N_\gamma \quad (9.3)$$

Innført i likning (9.2) gir dette et produkt med $|N| = \sum_\gamma N_\gamma$ faktorer. Multipliseres dette ut finnes $M^{|N|}$ ledd av typen⁴:

$$(\int_{V_i} dq_{i_\gamma})_1 (\int_{V_i} dq_{i_\gamma})_2 \cdots (\int_{V_i} dq_{i_\gamma})_{|N|} e^{-\beta(V_N(q))} \quad (9.4)$$

Hvert av disse integralene kan så tilnærmes ved at integranden evalueres med variable innenfor integrasjonsområde (f.eks. koordinatene sentrert i sine respektive ”bokser”.) og multipliseres med $(\Delta V)^{|N|}$.

Dette tilsvarer da en oppsplitting av Konfigurasjonsintegralet i summer over de forskjellige partikkelenkonfigurasjoner. En partikkelenkonfigurasjon spesifisieres med antallet, σ_γ^m , partikler av type γ i volumdel m , med merkelapp på partiklene. Antall partikkelenkonfigurasjoner til en energikonfigurasjon er:

$$\frac{N!}{\sigma^1! \cdots \sigma^M!} \stackrel{\text{def}}{=} \prod_\gamma \frac{N_\gamma!}{\sigma_\gamma^1! \cdots \sigma_\gamma^M!} \quad (9.5)$$

Faktoren $N_\gamma!$ kommer av antall måter å permutere partikler av type γ . Deler ut med faktor $\sigma_\gamma^m!$ fordi permuteringer innenfor volumdel m gir opphav til samme energi. Faktoren

¹Omformuleringen som dette kapittelet dreier seg om er vakker. Jeg er takknemmelig ovenfor Kåre Olausen, min veileder på prosjektet, som viste meg den.

²I grensen $M \rightarrow \infty$ er dette definisjonen av integralet.

³Resonnementet som følger er kanskje unødig detaljert. Jeg tar det med fordi det ga meg en bedre følelse av hva Konfigurasjonsintegralet inneholder.

⁴Det er enklere å glemme partikkeltypen begrepet her, og bare operere med partikler $1, \dots, N$ med ladninger e_1, \dots, e_N . Jeg følger den unødig tungvinte varianten da det var den jeg fulgte først. Svaret blir heller ikke mørre generelt...

i likning (9.5) kommer altså inn fordi en ikke kan skille (i en energibetraktnings) på to partikler av type γ . Morsomt å minne om at dette prinsippet kommer inn helt fra starten av i en kvantemekanisk formulering der man opererer med sansynligheter fra starten.

Tilnærmelsen til Konfigurasjonsintegralet, Konfigurasjonssummen, blir da:

$$Q_N^M = \sum_{\sigma_\gamma^1 + \dots + \sigma_\gamma^M = N_\gamma} \frac{N!}{\sigma^1! + \dots + \sigma^M!} e^{-\beta(V_N(\sigma))} (\Delta V)^{|N|} \quad (9.6)$$

Når jeg følger konvensjonen at γ 's tallverdi anngir ladningen til partikler av type γ er energien til en konfigurasjon:

$$V_N(\sigma) = \frac{1}{2} \sum_{\gamma_1, \gamma_2} \gamma_1 \gamma_2 \cdot \sigma_{\gamma_1}^{m_1} V_{m_1 m_2} \sigma_{\gamma_2}^{m_2} - \frac{1}{2} \sum_m \gamma^2 \cdot \sigma_\gamma^m V(0) \quad (9.7)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{m_1, m_2} \sigma^{m_1} V_{m_1 m_2} \sigma^{m_2} - \frac{1}{2} \sum_m \gamma^2 \cdot \sigma_\gamma^m V(0) \quad (9.8)$$

Har her innført $\sigma^m = \sum_\gamma \gamma \sigma_\gamma^m$, som er ladningen i volumdel m .

likning (9.7) er korrekt fordi energien p.g.a. vekselvirkningen mellom volumdelene er:

$$V_{deler} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ \gamma_1, \gamma_2}} \gamma_1 \sigma_{\gamma_1}^{m_1} \cdot V_{m_1 m_2} \cdot \gamma_2 \sigma_{\gamma_2}^{m_2} - \frac{1}{2} \sum_{\substack{m_1 = m_2 \\ \gamma_1, \gamma_2}} \gamma_1 \sigma_{\gamma_1}^{m_1} \cdot V_{m_1 m_2} \cdot \gamma_2 \sigma_{\gamma_2}^{m_1} \quad (9.9)$$

Men man må også ta hensyn til vekselvirkningsenergien i hver volumdel:

$$V_{indre} = \frac{1}{2} \sum_{\gamma_1, \gamma_2} \gamma_1 \sigma_{\gamma_1}^m \cdot V_{mm} \cdot \gamma_2 \sigma_{\gamma_2}^m - \frac{1}{2} \sum_m \gamma \sigma_\gamma^m \cdot V_{mm} \cdot \gamma \sigma_\gamma^m \quad (9.10)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_m \gamma^2 \sigma_\gamma^m (\sigma_\gamma^m - 1) V_{mm} \quad (9.11)$$

Det siste ledet kommer av vekselvirkningen mellom σ_γ^m partikler av type γ i volumdel m . Riktigheten innsees ved å fylle en volumdel med like partikler:

En partikkelen har null energi.

To partikkelen har energi $+\gamma^2 V(0)$.

Den tredje partikkelen gir et tillegg $+2\gamma^2 V(0)$. Og videre:

Den σ_γ^m te partikkelen gir et tillegg $+(\sigma_\gamma^m - 1)\gamma^2 V(0)$.

Tilsammen $\frac{1}{2}\gamma^2 \sigma_\gamma^m (\sigma_\gamma^m - 1) V_{mm}$.

Nå kan Den Store Kanoniske Partisjonsfunksjon tilnærmes (her ved den gitte partisjon/oppdeling av volumet...)⁵:

⁵Her er multiindeksnotasjonen meget kompakt. Merk at $|\sigma| = |N|$, hvor førstnevnte er en dobbelsum.

$$\Xi^M \stackrel{def}{=} \sum_{(N_\gamma)} \frac{z_\gamma^N}{N!} Q_N^M \quad (9.12)$$

$$\stackrel{(9.6)}{=} \sum_{\sigma} \frac{z_\gamma^\sigma}{\sigma!} e^{\beta(\frac{1}{2} \sum_{m,\gamma} \gamma^2 \sigma_\gamma^m V(0) - \frac{1}{2} \sum_{m_1,m_2} \sigma^{m_1} V_{m_1 m_2} \sigma^{m_2})} (\Delta V)^{|\sigma|} \quad (9.13)$$

$$= \sum_{\sigma} \prod_{m,\gamma} \frac{(\Delta V z_\gamma e^{\beta(\frac{1}{2} V(0) \gamma^2)})^{\sigma_\gamma^m}}{\sigma_\gamma^m!} e^{-\beta(\frac{1}{2} \sum_{m_1,m_2} \sigma^{m_1} V_{m_1 m_2} \sigma^{m_2})} \quad (9.14)$$

Poenget i omskrivningen så langt har vært å gå fra N til σ . Den siste faktoren kan nå omskrives ved et triks som er kjernen i alle beregninger videre.

9.2 Gauss integral trikket

Det er ikke vanskelig å vise at:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2}} = \sqrt{2\pi} \quad (9.15)$$

Eller etter et variabelskifte at:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}ax^2} dx = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} \quad (9.16)$$

Ved et produkt av M slike integral følger den M -dimensjonale varianten:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}a_1 x_1^2 - \dots - \frac{1}{2}a_M x_M^2} dx = \sqrt{\frac{(2\pi)^M}{a_1 \dots a_M}}, a_m \geq 0 \quad (9.17)$$

Som også kan skrives på matriseform:

$$\int_{\mathbf{R}^M} e^{-\frac{1}{2}x^T A x} dx = \sqrt{\frac{(2\pi)^M}{\det A}} \quad (9.18)$$

Denne gjelder også for matriser A som ikke er diagonale. Hvis A er hermetisk og $\det A \geq 0$ kan en skifte variable slik at en står igjen med en diagonal matrise. Da kan likning (9.17) benyttes.

Ta deretter utgangspunkt i et annet avvik fra likning (9.15):

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}ax^2 + bx} dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}a(x+b/a)^2 + \frac{b^2}{2a}} dx = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{2a}} \quad (9.19)$$

Ved å først la $b \rightarrow ib$ etterfulgt av overstående generalisering til det M -dimensjonale tilfellet følger en pen formel:

$$\int_{\mathbf{R}^M} e^{-\frac{1}{2}x^T Ax + ib^T x} dx = \sqrt{\frac{(2\pi)^M}{\det A}} e^{-\frac{1}{2}b^T A^{-1}b} \quad (9.20)$$

Eller for å snu litt på det hele:

$$e^{-\frac{1}{2}b^T Ab} = \frac{\int_{\mathbf{R}^M} e^{-\frac{1}{2}x^T A^{-1}x + ib^T x} dx}{\sqrt{\frac{(2\pi)^M}{\det A^{-1}}}} = \frac{\int_{\mathbf{R}^M} e^{-\frac{1}{2}x^T A^{-1}x + ib^T x} dx}{\int_{\mathbf{R}^M} e^{-\frac{1}{2}x^T A^{-1}x} dx} \quad (9.21)$$

Merk kravet for at normeringsintegralet i nevneren skal eksistere:

$$A^{-1} \text{ symmetrisk} \quad (9.22)$$

$$\det A^{-1} \geq 0 \quad (9.23)$$

9.3 Partisjonsfunksjonen

Kan nå benytte likning (9.21) i likning (9.12):

$$\Xi^M \stackrel{def}{=} \sum_{(N_\gamma)} \frac{z^N}{N!} Q_N^M \quad (9.24)$$

$$\stackrel{(9.6)}{=} \sum_{\sigma} \frac{z^\sigma}{\sigma!} e^{\beta(\frac{1}{2} \sum_{m,\gamma} \gamma^2 \sigma_\gamma^m V(0) - \frac{1}{2} \sum_{m_1,m_2} \sigma^{m_1} V_{m_1 m_2} \sigma^{m_2})} (\Delta V)^{|\sigma|} \quad (9.25)$$

$$= \sum_{\sigma} \prod_{m,\gamma} \frac{(\Delta V z_\gamma e^{\beta(\frac{1}{2} V(0) \gamma^2)})^{\sigma_\gamma^m}}{\sigma_\gamma^m} e^{-\beta(\frac{1}{2} \sum_{m_1,m_2} \sigma^{m_1} V_{m_1 m_2} \sigma^{m_2})} \quad (9.26)$$

$$\stackrel{(9.21)}{=} \sum_{\sigma} \prod_{m,\gamma} \frac{\int_{\mathbf{R}^M} e^{-\frac{1}{2}x^T (V_{ij})^{-1}x} \frac{(\Delta V z_\gamma e^{\beta(\frac{1}{2} V(0) \gamma^2 + i\sqrt{\beta} x_m \gamma)})^{\sigma_\gamma^m}}{\sigma_\gamma^m!} dx}{\int_{\mathbf{R}^M} e^{-\frac{1}{2}x^T (V_{ij})^{-1}x} dx} \quad (9.27)$$

$$= \frac{\int_{\mathbf{R}^M} e^{-\frac{1}{2}x^T (V_{ij})^{-1}x} e^{\sum_{\gamma,m} \Delta V z_\gamma e^{\beta(\frac{1}{2} V(0) \gamma^2 + i\sqrt{\beta} x_m \gamma)}} dx}{\int_{\mathbf{R}^M} e^{-\frac{1}{2}x^T (V_{ij})^{-1}x} dx} \quad (9.28)$$

I siste overgang er den kjære $e^t = 1 + t + \frac{1}{2}t^2 + \dots$ benyttet. Trikket forutsetter at $(V_{ij})^{-1}$ er hermitisk. Det er ikke umiddelbart klart for meg at det er tilfellet med den gitte symmetriske parrpotensialmatrisen $(V_{m_1 m_2})$. Det som er klart er at hvis V^{-1} eksisterer, så er den symmetrisk. Det følger f.eks.fra Crammers regel. Problemet blir å finne ut når det V er forskjellig fra null. Det vil den være hvis diagonalelementene dominerer totalt. I grensen null regularisering vil diagonalelementene $V(0)$ være uendelig store, mens alle andre elementer vil være endelige. Verdt å minne om at alle andre elementer enn diagonalelementene kan plasseres vilkårlig fordi nummereringen av volumdelene er vilkårlig.

En videre drøfting av slike matriser ville nok være interesant, men her strakk ikke min tid til.

Partisjonsfunksjonen kan nå (formelt) finnes ved $\Xi = \lim_{M \rightarrow \infty} \Xi^M$. Når denne grensen tas tenkes volumet V fiksert, den termodynamiske grensen kommer etterpå.

Så gjenstår det å tolke de resterende størrelsene i grensen $\lim_{M \rightarrow \infty}$:

Hjelpestørrelsen x_m har en verdi for hver volumdel. Dette er på samme måte som $V_{m_1 m_2}$ har en verdi for to gitte volumdeler. Sistnevnte går over til $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, parrpotensialet. Skal det være noen rimelighet i dette må da:

$$\lim_{M \rightarrow \infty} x_m = \phi(\vec{r}_m) \quad (9.29)$$

Av konvensjonsgrunner har jeg valgt å kalle funksjonen for ϕ . I denne sammenhengen kalles ofte ϕ for et stokastisk felt. Grunnen blir klarere etterhvert.

I tråd med overgangen fra sum til integral i innledningen til dette kapittelet følger nå:

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \sum_{\gamma, m} \Delta V z_\gamma e^{\beta(\frac{1}{2}V(0)\gamma^2 + i\sqrt{\beta}x_m\gamma)} = \sum_{\gamma} \int_V z_\gamma e^{\beta(\frac{1}{2}V(0)\gamma^2 + i\sqrt{\beta}\phi(\vec{r})\gamma)} d^3r \quad (9.30)$$

Litt tyngre å svele er kanskje:

$$\lim_{M \rightarrow \infty} -\frac{1}{2} x^T (V_{ij})^{-1} x = -\frac{1}{2} \int_{V^2} \phi(\vec{r}_1) \hat{V}^{-1} \phi(\vec{r}_2) d^6r \quad (9.31)$$

$$= -\frac{1}{2} \int_V \phi(\vec{r}) \frac{1}{2\pi} [\Lambda^{-2} \nabla^4 - \nabla^2 + \epsilon^2] \phi(\vec{r}) d^3r \quad (9.32)$$

Overgangen til integral er lettfordøyelig da den følger vanlige indreprodukt konvensjoner. $\frac{1}{2\pi} [\Lambda^{-2} \nabla^4 - \nabla^2 + \epsilon^2]$ er heller ikke tatt helt ut av luften. I følge (3.13) på side 9:

$$\frac{1}{2\pi} [\Lambda^{-2} \nabla^4 - \nabla^2 + \epsilon^2] \frac{V_R(r)}{e_1 e_2} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2\pi} [\Lambda^{-2} \nabla^4 - \nabla^2 + \epsilon^2] V(r) = \delta(\vec{r}) \quad (9.33)$$

En rask begrunnelse for at det overstående skal være et argument er:

$$[\hat{A}f](x) = \delta(x) \quad (9.34)$$

$$g(y) = \int \delta(x-y) g(x) dx = \int [\hat{A}f](x-y) g(x) dx \quad (9.35)$$

som viser at \hat{A} effektivt er den inverse til f .

Så til det morsomste problemet. Hvordan tolke:

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \int_{\mathbf{R}^M} F[x] dx \stackrel{\text{def}}{=} \int_{S[V]} F[\phi] \mathcal{D}\phi \quad (9.36)$$

Integralet i likning (9.36) er summen av bidrag fra F evaluert⁶ i alle punkter i \mathbf{R}^M . I grensen $\lim_{M \rightarrow \infty}$ tilsvarer et punkt i \mathbf{R}^M en funksjon definert på V , $\phi \in S[V]$. Jeg lar altså $S[V]$ være mengden av de stokastiske funksjoner definert på V . Kan ikke spesifisere funksjonsmengden mere presist da mine matematiske kunnskaper her er lik null. Høyresiden i likning (9.35) er da summen av bidrag fra alle $\phi \in S[V]$. Hvis høyresiden eksisterer kan man altså integrere funksjonalen $F[\phi]$ over $S[V]$, og høyresiden betegnes da naturlig som et funksjonalintegral. Aberet her er at generelt vil dette integralet være uendelig, ikke så urimelig da det er uendeligdimensjonalt.

Heldigvis er ikke likning (9.24) på samme fasong som likning (9.36). Den har formen:

$$\frac{\int_{S[V]} \mu[\phi] F[\phi] \mathcal{D}\phi}{\int_{S[V]} F[\phi] \mathcal{D}\phi} \stackrel{\text{def}}{=} \langle F[\phi] \rangle_\mu \quad (9.37)$$

Likningen tolkes tryggest ved at grensen til funksjonalintegral tas etter divisjonen. Her har man delt ut med et (uendelig) normeringsintegral slik at:

$$\langle 1 \rangle_\mu = 1 \quad (9.38)$$

Hvis man tenker seg en funksjonal F som er 0 bortsett fra når $\phi = \text{polynom}$, og da lik 1, så har man et mål på størrelsen av polynommengden i $S[V]$ ved $\langle F \rangle_\mu$. Målet avhenger av μ . Her gir likning (9.37) naturlig spranget til forståelsen av innholdet i ordet stokastisk felt. Hvis x er en reell stokastisk variabel, så finnes middelverdier ved sannsynlighetstettheten f :

$$\frac{\int_{\mathbf{R}} f(x) A(x) dx}{\int_{\mathbf{R}} f(x) dx} \stackrel{\text{def}}{=} \langle A(x) \rangle_f \quad (9.39)$$

Dette er helt analogt med likning (9.37).

I notasjonen som er innført har en nå den endelige formen til partisjonsfunksjonen for en vekselvirkende gass i D dimensjoner i et volum V :

$$\Xi = \left\langle e^{\sum_\gamma \int_V z_\gamma e^{\frac{1}{2} \beta V(0) \gamma^2 + i \sqrt{\beta} \phi(\vec{r}) \gamma}} \right\rangle_\mu \quad (9.40)$$

⁶Når dette tolkes som et Riemann integral.

Alt om vekselvirkningen er inneholdt i vektfunksjonalen μ . I to dimensjoner med regularisert Coulombvekselvirkning er:

$$\mu[\phi] \stackrel{def}{=} e^{-S_0} = e^{-\frac{1}{2} \int_V \phi(\vec{r}) \frac{1}{2\pi} [\Lambda^{-2} \nabla^4 - \nabla^2 + \epsilon^2] \phi(\vec{r}) d^3 r} \quad (9.41)$$

Matematikken som ligger bak det overstående er fristende å grave seg ned i, det er jo så pent. Jeg begynte såvidt, men tiden løp fra meg. For interesserte anbefaler jeg [15, 17, 21, 18, 19, 20]. De to første er grunnleggende, den andre konsentrerer seg om funksjonalintegral og de tre siste ser mere på applikasjoner.

En meget kort innføring med applikasjoner for en fysiker finnes i [16, 1], hvor jeg hadde særlig nytte av førstnevnte.

9.4 En raskere omskrivning

Det følgende er en raskere transformasjon enn foregående. Det er slik man kan gjøre i ettertid. Her fungerer det som en kontroll.

Den potensielle energien er som før gitt ved:

$$V(q) = \frac{1}{2} \sum_{i,j} e_i e_j V(q_i - q_j) - \frac{1}{2} \sum_i e_i^2 V(0) \quad (9.42)$$

Og da er Konfigurasjonsintegralet:

$$Q_N = \int dq e^{-\beta(\frac{1}{2} \sum_{i,j} e_i e_j V(q_i - q_j) - \frac{1}{2} \sum_i e_i^2 V(0))} \quad (9.43)$$

Benytter så Gausintegraltrikket, som i den kontinuerlige grensen er:

$$\left\langle e^{i \int_V \phi(x) j(x) dx} \right\rangle = e^{-\frac{1}{2} \int_V j(x_1) V(x_1 - x_2) j(x_2) dx_1 dx_2} \quad (9.44)$$

Har sløyfet indeks på midlingen. Midling ved det aktuelle potensial underforståes. Vide-re er her x en D -dimensjonal romkoordinat, $x \in V$. Velges spesielt $j(x) = \sqrt{\beta} \sum_i e_i \delta(x - q_i)$ fås⁷:

$$\left\langle e^{i \sqrt{\beta} \sum_i e_i \phi(q_i)} \right\rangle = e^{-\frac{\beta}{2} \sum_{i,j} e_i e_j V(q_i - q_j)} \quad (9.45)$$

⁷Det er deltafunksjoner fordi en har punktpartikler. Ved å ”smøre” deltafunksjonene noe ut har en oppnådd åfjerne problemene ved korte avstander. Dette er et godt alternativ, kanskje bedre, enn å innføre Λ slik vi har gjort. Denne metoden synes mere intuitivt riktig da en ”utsmørt” deltafunksjon tilsvarer en konkret beskrivelse av den fysiske utstrekning til partikkelenes ladningsfordeling. Dette har jeg fra [29]

Denne benyttes i likning (9.43) og ved å trekke integrasjonen innenfor midlingen⁸ finnes:

$$Q_N = \left\langle \prod_i \int_V e^{i\sqrt{\beta}e_i\phi(q_i) + \frac{\beta}{2}e_i^2V(0)} dq_i \right\rangle = \left\langle \prod_\gamma \left[\int_V e^{i\sqrt{\beta}\gamma\phi(q) + \frac{\beta}{2}\gamma^2V(0)} dq \right]^{N_\gamma} \right\rangle \quad (9.46)$$

Den Store Kanoniske Partisjonsfunksjonen finnes nå enkelt:

$$\Xi = \sum_N \frac{z^N}{N!} Q_N = \left\langle \prod_\gamma e^{z\gamma e^{\frac{\beta}{2}\gamma^2V(0)} \int_V e^{i\sqrt{\beta}\gamma\phi(q)} dq} \right\rangle \quad (9.47)$$

Poenget i omskrivningen er nå klart. Det hele viler på Gausintegraltrikket som benyttes for omskriving av Q_N . Når det er gjort kan summasjonen i Den Store Kanoniske Partisjonsfunksjonen utføres.

Det er trivielt å forenkle til tilfellet med to typer partikler med motsatt like stor ladning = 1. Systemet blir nøytralt ved $z_+ = z_- = z$. Får da:

$$\Xi = \left\langle e^{ze^{\frac{\beta}{2}V(0)} \int_V 2 \cos \sqrt{\beta}\phi(q) dq} \right\rangle \quad (9.48)$$

Og det er denne siste formen som er knyttet til Sine-Gordon teorien. I følge [29] gir likning (9.48) grunntilstandsenergien E_0 til Sine-Gordon systemet:

$$E_0 \cdot T = \Xi \quad (9.49)$$

Det er ikke vanskelig å kontrollere riktigheten av likning (9.48) ved å rekkeutvikle etter z , for så å bruke regneregelen likning (9.45). Det vil være så likt overstående at jeg sløyfer det. Forskjellen er at en ville ende opp med spesialtilfeller av likning (9.46).

9.5 Stokastisk potensial

Vil i det følgende gi en tolkning av hjelpestørrelsen ϕ , som ble innført ved overgangen til et funksjonalintegral.

Et system av ikke vekselvirkende partikler i et yttre potensial Φ har potensiell energi:

$$V_\Phi = \sum_\gamma \sum_{n_\gamma=1}^{N_\gamma} \Phi(q_{n_\gamma}) \quad (9.50)$$

⁸Her burde man nok være forsiktig..

Konfigurasjonsintegralet finnes da enkelt:

$$Q_{\Phi,N} = \int_{V^{|N|}} dq e^{-\beta V_\Phi} = \prod_\gamma \left[\int_V dx_\gamma e^{-\beta \Phi(x_\gamma)} \right]^{N_\gamma} \quad (9.51)$$

Partisjonsfunksjonen følger like greit:

$$\Xi_\Phi = \sum_{N=(0)}^\infty \frac{z^N}{N!} Q_{\Phi,N} = \prod_\gamma e^{z_\gamma \int_V dx_\gamma e^{-\beta \Phi(x_\gamma)}} \quad (9.52)$$

Dette uttrykket er slående likt det en fant for en vekselvirkende gass ⁹:

$$\Xi = \left\langle \prod_\gamma e^{z_\gamma e^{\frac{1}{2}\beta\gamma^2 V(0)} \int_V dx e^{-i\gamma\sqrt{\beta}\phi}} \right\rangle_\phi \quad (9.53)$$

Ser at likning (9.5) fåes fra likning (9.4) ved substitusjonen:

$$\Phi(x_\gamma) = \frac{i}{\sqrt{\beta}} \gamma \phi - \gamma^2 V(0)/2 \quad (9.54)$$

etterfulgt av en midling over feltet.

Følgende bilde er da nærliggende:

Et system med vekselvirkende partikler er ekvivalent med et system med uavhengige partikler i et stokastisk yttre felt. Vekselvirkingens natur gir fordeleingsfunksjonalen og omvendt.

Spesielt vil en for (vanlige) parrvekselvirkninger få en Gausisk fordeling.

Særlig tiltalende blir dette bildet når en minner om det kvantefeltteoretiske bilde av en vekselvirkning. Der viser det seg at feltledd i Lagrangefunksjonen til et vekselvirkende system selv er opphav til nye partikler. F.eks. vil et elektronsystem ha et vekselvirkningsledd $\propto A_\mu j^\mu$ hvor, j , strømtettheten er gitt av elektronfeltet mens A er feltet tilhørende fotonene. Billedlig er fjernvekselvirkningen erstattet med en utveksling av fotoner. Ser man på elektronsystemet som et statistisk mekanisk system vil eksistensen av fotoner ¹⁰ ”som svirrer omkring blant elektronene” naturlig beskrives ved at elektronene er utsatt for en tilfeldig påvirkning, det stokastiske feltet.

Nytten av et slikt bilde kan sikkert stilles spørsmålstege med. Det kan brukes til en intuitiv utledning av Debye-Hückel resultatet fra funksjonalintegralformuleringen, j.m.f. [29, s.1917-1918].

⁹Indeksen ϕ indikerer her hva det middles over.

¹⁰Riktignok skalare (ikke reelle) fotoner.

Kapittel 10

Saglios Partisjonsfunksjon

Det følgende tar utgangspunkt i et resultat publisert av Adriana M. Saglio i 1982,[29]. Utgangspunktet hennes var Coulombgassens tilknytning til den kvantiserte Sine-Gordon teorien.

10.1 Partisjonsfunksjonen

Ved metoder som ligger utenfor det jeg kan finne hun grunntilstandsenergien til Sine-Gordon systemet, E . Dermed er også partisjonsfunksjonen bestemt, ved $f_S = TE$. Hun finner:

$$f_S(z_S, T) = -A(T) \frac{T}{a^2} [a_\gamma^{2-2\nu} \cdot \frac{1-4T}{2-4t} (\frac{4\pi}{T} z_S)^{2\nu} - \frac{1-4T}{2-4T} (\frac{4\pi}{T} z_S)^2 + \frac{1}{2} a_\gamma^{-2\nu} \cdot \frac{1-4T}{1-6T} (\frac{4\pi}{T} z_S)^{2\nu+2} - \frac{1}{2} a_\gamma^2 \cdot \frac{1-4T}{1-6T}] \quad (10.1)$$

hvor:

$$A(\gamma = \frac{\pi}{4T}) = \frac{1}{64\pi(2\gamma-\pi)} [\frac{1-2q}{4} \cos \gamma - \frac{1}{4} \sin ((2q-1)(\pi-\gamma)) \cot \gamma + \sin^2 q(\pi-\gamma) \tan \left[\frac{1}{2}\pi \left(\frac{\pi}{\pi-\gamma} - q + 1 \right) \right] + \sin q(\pi-\gamma) \sin(q-1)(\pi-\gamma)] \quad (10.2)$$

$$+ \sin q(\pi-\gamma) \sin(q-1)(\pi-\gamma)] \quad (10.3)$$

$$a_\gamma = \frac{16\pi}{\sin \gamma} \quad (10.4)$$

$$\gamma = \frac{\pi}{4T} \quad (10.5)$$

$$2\nu = \frac{\pi}{\pi - \gamma} \quad (10.6)$$

$$z_S = e^{\mu\beta} = \Lambda^2 z = \frac{\beta h^2}{2\pi m_\gamma} z \quad (10.7)$$

$$\frac{q}{q+1} \leq \gamma/\pi < \frac{q+1}{q+2}, \quad q = 1, 2, 3, \dots \quad (10.8)$$

At ikke deBroglie bølgelengden er med i hennes fugasitet, z_s , er noe som også går igjen i svært mange av de artiklene jeg har lest, f.eks.[29, 36]. Jeg får alltid en litt ubehagelig følelse når jeg oppdager slikt. Temperaturavhengigheten er jo den jeg er mest opptatt av. DeBroglie bølgelengden kommer av det kinetiske leddet i Hamiltonfunksjonen som lar seg integrere ut i en klassisk beskrivelse. I en kvantemekanisk beskrivelse lar ikke energien seg separere så enkelt, energienverdiene er for totalenergien. I stedet for fugasiteten opererer en derfor ofte med aktiviteten, som fåes ved å sløyfe DeBroglie bølgelengden i fugasiteten.

Det mest spennende i overstående formel er heltallsvariablen q . Den bestemmer hvilket temperaturområde en ser på. Det kan og virke som om,[29, s.371], den gir en skranke på hvor mange partikler som kan ”slå seg sammen til en”.

For $q = 1$ finner jeg¹:

$$A(q) = \frac{1}{64\pi(2\gamma - \pi)} \left[\sin^2 \gamma \tan \frac{\pi^2}{2(\pi - \gamma)} - \frac{1}{2} \cos \gamma \right], \quad \frac{3}{8} < T \leq \frac{1}{2} \quad (10.9)$$

Dette ville vært et pent resultat for en seksjon av det kritiske temperaturområde. Ved slike temperaturer er det ikke uten videre lett å kontrollere resultatet ved en temperaturutvikling.

Gjør en tilsnikelse og antar at likning (10.2) også gjelder for $q = 0, T > \frac{1}{2}$. Det er ikke helt klart, ut fra [29, s.371], om dette temperaturområde er dekket av Saglios utledning. Her er det ihvertfall lettere å kontrollere riktigheten da tilstandslikningen er kjent. En finner:

$$A(\gamma) = \frac{1}{64\pi(2\gamma - \pi)} \frac{1}{2} \cos \gamma, \quad \frac{1}{2} < T \quad (10.10)$$

¹Her er det nok en trykkfeil hos Saglio. Mine beregninger stemmer med resultatet hos [38]

10.2 Termene i Saglios formel

Det første leddet i likning (10.1) tilsvarer en fri energi på samme fasong som den må ha i høytemperaturområde:

$$f_S^1 \propto z^{2\nu} = z^{\frac{1}{1-\beta/4}} \quad (10.11)$$

Hvis Hauge og Hemmers påstand,[30], om tilstandslikningen for lave temperaturer er riktig, så tilsvarer det andre leddet i likning (10.1) en slik løsning:

$$f_S^2 \propto z^2 \quad (10.12)$$

Dette ville gi tilstandslikningen, $f_S^2 = -p\beta$:

$$n = z \left(\frac{\partial p\beta}{\partial z} \right)_\beta = 2p\beta \quad (10.13)$$

$$p = nT/2 \quad (10.14)$$

Det tredje leddet er en blanding av de to foregående:

$$f_S^3 \propto z^{2\nu+2} \quad (10.15)$$

Dette leddet er i alle fall ikke urimelig. Noe slikt måtte en nesten vente hvis både høy- og lavtemperatur effekter skal tas med i betraktingene.

Det siste leddet er noe mere spesielt da det ikke avhenger av z . Partisjonsfunksjonen, slik den er definert, må gi $\Xi(z=0) = 1$, slik at $p\beta(z=0) = 0$. Velger derfor som Hinrichsen,[?, ?, s.160] å se bort fra dette leddet. Leddet kan skylles måten² Saglio har innført en (effektivt sett) hard kjerneparameter a i problemet.

10.3 Saglios første ledd

Hvis likning (10.1) skal gjelde for høye temperaturer ($T > \frac{1}{2}$), kan bare det første leddet gi noe bidrag. I min tidligere notasjon ville dette tilsvare resultatet:

$$p\beta = f_S^1 = d(\beta)z^{\frac{1}{1-\beta/4}} \quad (10.16)$$

²Synes ikke det framgår klart i [29, s.370 kontra s.374] hva a er.

$$d(\beta) = \frac{\cos \frac{\pi}{4} \beta \cdot (\beta - 4) 2}{\beta \sin^2 \frac{\pi}{4} \beta \cdot (\beta - 2)^2} \frac{1}{a^2} \mu \left(\frac{\beta^2 \sin \frac{\pi}{4} \beta}{4} \right)^{\frac{1}{1-\beta/4}} \quad (10.17)$$

$$g(\beta) = \frac{\cos \frac{\pi}{4} \beta \cdot (\beta - 4) 2}{\beta \sin^2 \frac{\pi}{4} \beta \cdot (\beta - 2)^2} \frac{1}{a^2} \quad (10.18)$$

$$h(\beta) = \frac{\beta^2 \sin \frac{\pi}{4} \beta}{4} \quad (10.19)$$

I utrykket for h har jeg lagt inn en faktor β fra DeBroglie bølgelengden. Er litt usikker på denne, det kan jo hende at DeBroglie bølgelengden er med i Saglios z .

Kan så benytte formlene fra kapittel 3 direkte. Finner:

$$h'/h = 2\beta^{-1} + \frac{\pi}{4} \cot\left(\frac{\pi}{4}\beta\right) \quad (10.20)$$

$$g'/g = -\frac{\pi}{4} \tan\left(\frac{\pi}{4}\beta\right) - \frac{\pi}{2} \cot\left(\frac{\pi}{4}\beta\right) + \frac{1}{\beta - 4} - \frac{2}{\beta - 2} - \beta^{-1} \quad (10.21)$$

Noterer og resultatet hvis Saglios z er den samme som min:

$$(h'/h)_1 = \beta^{-1} + \frac{\pi}{4} \cot\left(\frac{\pi}{4}\beta\right) \quad (10.22)$$

D.v.s. fjerning av en 2 faktor.

(??) på side ?? gir da energien:

$$u = n \left[\frac{\pi}{4} \cot\left(\frac{\pi}{4}\beta\right) - \frac{\pi}{8} \beta \cot\left(\frac{\pi}{4}\beta\right) - \frac{1}{2} \frac{4-\beta}{2-\beta} + \frac{\pi}{4} (1 - \beta/4) \tan\left(\frac{\pi}{4}\beta\right) \right] \quad (10.23)$$

$$+ \frac{1}{4} \ln \frac{2\pi \cos\left(\frac{\pi}{4}\beta\right)}{\sin^2\left(\frac{\pi}{4}\beta\right) (\beta-2)^2 \beta n a^2} \quad (10.24)$$

Allerede her er det klart at likning (10.22) ikke kan være aktuell. Førsteordens resultat ville da ikke stemme med ideell gass.

For å finne varmekapasiteten via (??) på side ?? trenges:

$$(g'/g)' = \left(\frac{\pi}{4}\right)^2 \left(-\frac{1}{\cos^2\left(\frac{\pi}{4}\beta\right)} + 2 \frac{1}{\sin^2\left(\frac{\pi}{4}\beta\right)} \right) - \frac{1}{(\beta-4)^2} + \frac{2}{(\beta-2)^2} + \beta^{-1} \quad (10.25)$$

$$(h'/h)' = -2\beta^{-2} - \left(\frac{\pi}{4}\right)^2 \frac{1}{\sin^2\left(\frac{\pi}{4}\beta\right)} \quad (10.26)$$

Og etter enda litt mere algebra finnes:

$$c_V = n\beta^2 \left[\left(\frac{\pi}{4} \right)^2 \left(\frac{1}{\sin^2(\frac{\pi}{4}\beta)} \right) - \frac{1}{\cos^2(\frac{\pi}{4}\beta)} + \frac{\pi}{4} \left(\frac{1}{\cos^2(\frac{\pi}{4}\beta)} - \frac{2}{\sin^2(\frac{\pi}{4}\beta)} \right) \right] \quad (10.27)$$

$$+ \frac{1}{4}\beta^{-1} - \frac{1}{2-\beta} + \frac{1}{2} \frac{4-\beta}{(2-\beta)^2} + \frac{\pi}{4} \cot(\frac{\pi}{4}\beta) + \frac{\pi}{8} \tan(\frac{\pi}{4}\beta) \quad (10.28)$$

Disse likningene for u og c_V ville være fine resultat, men det er vel tvilsomt om de holder.

For å kunne kontrollere er det praktisk å se på en høytemperaturutvikling av likning (10.27). Trenger da:

$$\sin^{-2} x = x^{-2}(1 + x^2/3 + x^4/15 + \dots) \quad (10.29)$$

$$\cos^{-2} x = 1 + x^2 + 2x^4/3 + \dots \quad (10.30)$$

$$\sin^{-2} x - \cos^{-2} x = x^{-2} - 2/3 - 14x^2/15 + \dots \quad (10.31)$$

$$\cos^{-2} x - 2 \sin^{-2} x = -2x^{-2} + 1/3 + 13x^2/15 + \dots \quad (10.32)$$

$$\frac{4-\beta}{(2-\beta)^2} = \frac{1}{4}(1 + \beta + 3\beta^2/4 + \dots) \quad (10.33)$$

$$\cot x = x^{-1} - x/3 - x^3/45 + \dots \quad (10.34)$$

$$\tan x = x + x^3/3 + 2x^5/15 + \dots \quad (10.35)$$

Etter noe algebra finnes:

$$c_V = n \left[1 + \beta^{-1} - \left(\frac{\pi^2}{24} + 3/8 \right) \right] \quad (10.36)$$

Dette stemmer ikke overens med resultatet fra Debye-Hückel tilnærmelsen.

Tilsvarende regning med antagelse om at $q = 1$ tilfellet skal gjelde ogsåfor høye temperaturer, d.v.s. ved å benytte likning (10.9) istedet for likning (10.10), gir :

$$c_V = n\beta^2 \left[\left(\frac{\pi}{4} \right)^2 \left(\frac{1}{\sin^2(\frac{\pi}{4}\beta)} \right) - g'_1(\gamma) + \frac{\pi}{4} \left(g'_1(\gamma) - \frac{2}{\sin^2(\frac{\pi}{4}\beta)} \right) \right] \quad (10.37)$$

$$+ \frac{1}{4}\beta^{-1} - \frac{1}{2-\beta} + \frac{1}{2} \frac{4-\beta}{(2-\beta)^2} + \frac{\pi}{4} \cot(\frac{\pi}{4}\beta) + \frac{\pi}{8} g_1(\beta) \quad (10.38)$$

Hvor:

$$g_1(\gamma = \frac{\pi}{4}\beta) = \frac{2 \sin 2\gamma \tan \frac{\pi^2}{2(\pi-\gamma)} + \sin^2 \gamma \frac{\pi^2}{(\pi-\gamma)^2 \cos^2 \frac{\pi^2}{2(\pi-\gamma)}} + \sin \gamma}{\cos \gamma - 2 \sin^2 \gamma \tan \frac{\pi^2}{2(\pi-\gamma)}} \quad (10.39)$$

Nøyer meg med å se på en høytemperaturutvikling her og. En liten omskrivning gir (Kanskje Macsyma hadde egnet seg...):

$$\tan \frac{\pi^2}{2(\pi - \gamma)} = -\cot \frac{\pi}{2} \left(\frac{\gamma}{\pi} + \frac{\gamma^2}{\pi} + \dots \right) = -\frac{2}{\pi} \left[\frac{\gamma^{-1}}{\pi} - 1 - \frac{1}{3} \left(\frac{\pi}{2} \right)^2 \frac{\pi}{\gamma} + \dots \right] \quad (10.40)$$

$$\sin^2 \gamma = \gamma^2 - \frac{1}{3} \gamma^4 + \dots \quad (10.41)$$

$$\tan \frac{\pi^2}{2(\pi - \gamma)} \sin^2 \gamma = -2 \left[\gamma - \frac{\gamma^2}{\pi} - 5\gamma^3/12 + \dots \right] \quad (10.42)$$

$$v = 2 \tan \frac{\pi^2}{2(\pi - \gamma)} \sin^2 \gamma - \cos \gamma = -1 - 4\gamma + [4/\pi + 1/2]\gamma^2 + 3\gamma^3 + \dots \quad (10.43)$$

$$v'/v = 4 - (17 + 8/\pi)\gamma + (61 + 48/\pi)\gamma^2 + \dots \quad (10.44)$$

Denne siste rekken er det som kommer inn i stedet for:

$$(\cos \gamma)' / \cos \gamma = -\tan \gamma = -(\gamma + x^3/3 + 2x^5/15 + \dots) \quad (10.45)$$

i uttrykket for u og c_V . Tilsvarende blir $1/\cos^2 \gamma$ erstattet av:

$$(-v'/v)' = (17 + 8/\pi) - (122 + 96/\pi)\gamma + \dots \quad (10.46)$$

Den endelige rekkeutviklingen ,med utgangspunkt i $q = 1$ tilfellet blir da:

$$c_V = n[1 + \beta - (25\pi^2/24 - \pi - 3/8)\beta^2 + \dots] \quad (10.47)$$

d.v.s. fortsatt feil allerede i første avvik fra ideell gass.

10.4 Saglios andre ledd

Ved bare å ta hensyn til det andre ledet i likning (10.1) finnes:

$$p\beta = d(\beta)z^2 \quad (10.48)$$

som gir den forventede tilstandslikning ved lave temperaturer i grensen null hard kjerne:

$$n = z \left(\frac{\partial p\beta}{\partial z} \right)_{\beta} = 2p\beta \quad (10.49)$$

varmekapasiteten finnes nå enkelt ved:

$$u = nT - \left(\frac{\partial p\beta}{\partial \beta} \right)_z = nT - \frac{nd'}{2d} \quad (10.50)$$

$$c_V = -\beta^2 \left(\frac{\partial u}{\partial \beta} \right)_n = n + \frac{n\beta^2}{2} (d''/d - (d'/d)^2) \quad (10.51)$$

Saglios uttrykk for d finnes da ved likning (10.9) og likning (10.1):

$$d(\beta) = -A(\gamma) \frac{T}{a^2} \cdot \frac{1-4T}{2-4T} (4\pi\beta^2)^2 \quad (10.52)$$

$$= \frac{(2\sin^2 \gamma \tan \frac{\pi^2}{2(\pi-\gamma)} - \cos \gamma)(4-\beta)}{8(2-\beta)^2}, \quad \frac{3}{8} < T \leq \frac{1}{2} \quad (10.53)$$

Ved innsetting i likning (10.51) ville en dermed ha c_V på lukket form i en del av den kritiske fasen...

Dette ville også ha vært et pent resultat. For å få en mulighet til å kontrollere gyldigheten av likning (10.52) rekkeutvikler jeg i $x = \beta - 2 > 0$. Noe regning gir:

$$d(x = \beta - 2) = \frac{1}{8} \left(\frac{5\pi}{2} x^{-1} - \frac{\pi}{4} + \frac{7}{48 \cdot 4} x + \dots \right) \quad (10.54)$$

$$d'/d = -x^{-1} - 1/10 + \left(\frac{7}{240\pi} - 1/100 \right) x + \dots \quad (10.55)$$

$$(d'/d)' = x^{-2} + \left(\frac{7}{240\pi} - 1/100 \right) + \mathcal{O}(x) \quad (10.56)$$

Varmekapasiteten finnes dermed lik:

$$c_V = n + \frac{n}{2} (4x^{-1} + 2x^{-1} + 4 \left(\frac{7}{240\pi} - 1/100 \right) + 1 + \mathcal{O}(x)) \quad (10.57)$$

$$= n \left(\frac{2}{(\beta-2)^2} + \frac{1}{\beta-2} + \left(\frac{7}{120\pi} - 1/50 + 3/2 \right) \right) \quad (10.58)$$

$$+ \mathcal{O}((\beta-2)^1)) \quad (10.59)$$

For å kunne sammenligne med Hauge og Hemmers estimat,[30, s.214], omskrives de to første ledd:

$$\frac{2}{(\beta - 2)^2} + \frac{1}{\beta - 2} = \frac{1}{2}((1 - 2T)^{-2} - (1 - 2T)^{-1}) \quad (10.60)$$

Da Hauge og Hemmer har:

$$2N_{Hauge,Hemmer} = N \quad (10.61)$$

er det første leddet i full overensstemmels, $T_C = 1/2$. Det andre leddet finnes ikke hos Hauge og Hemmer, men det er bare det første leddet i deres estimat som kan forventes å være korrekt.

For å kunne tilbakevise resultatet i likning (10.57) må en altså regne til mer enn nullte orden. Nullte ordens resultat er understøttet også av andre, f.eks.[34, s.208].

Kapittel 11

En Høytemperaturutvikling

Skal nå fortsette med formuleringen fra kapittel 9. Målet er å finne en metode for å fastlegge en høytemperaturutvikling. Opprinnelig var det meningen å kunne tilbakevise Saglios formel ved en slik rekkeutvikling, men det er allerede påvist at Saglios formel ikke gjelder for $T > 1/2$.

Metoden er ikke desto mindre interesant av den grunn.

11.1 Regneregler

Omskrivningen i kapittel 9 bygger på følgende identitet:

$$G[j] = \left\langle e^{i \int_V \phi(x) j(x) dx} \right\rangle = e^{-\frac{1}{2} \int_{V^2} j(x_1) V(x_1 - x_2) j(x_2) dx_1 dx_2} \quad (11.1)$$

$G[j]$ kalles den karakteristiske funksjonalen uten grunn som vi skal se. Denne er (minst) like nyttig her som den momentgenererende funksjon $g(y) = \langle \exp(iy) \rangle$ er det i grunnkursene i statistikk. Ofte tas likning (11.57) som en definisjon av at fordelingen er Gausisk.

I kapittelet 9 ble også følgende spesialtilfelle påpekt.

$$\left\langle e^{i\sqrt{\beta} \sum_i e_i \phi(q_i)} \right\rangle = e^{-\frac{\beta}{2} \sum_{i,j} e_i e_j V(q_i - q_j)} \quad (11.2)$$

Og enda mere spesialisert:

$$\left\langle e^{i\sqrt{\beta} \phi(x)} \right\rangle = e^{-\frac{\beta}{2} V(0)} \quad (11.3)$$

Ved en rimelig definisjon av funksjonal derivasjon (tenk summer overalt hvor det står integral!) følger det av likning (11.1):

$$\frac{\partial^n G[j]}{\partial j_1 \cdots \partial j_n} = i^n \left\langle \phi_1 \cdots \phi_n e^{i \int dx \phi(x) j(x)} \right\rangle \quad (11.4)$$

hvor det er underforstått at $j_1 = j(x_1)$. Men man kan ogsåta utgangspunkt i likning (11.1) sin høyreside:

$$\frac{\partial}{\partial j_1} (G[j]) = -(j_k V_{1k}) e^{-\frac{1}{2} j_k V_{kl} j_l} \quad (11.5)$$

$$\frac{\partial^2 G}{\partial j_1 \partial j_2} = [(-1)^2 (j_k V_{1k})(j_k V_{2k}) - V_{12}] e^{-\frac{1}{2} j_k V_{kl} j_l} \quad (11.6)$$

$$\frac{\partial^3 G}{\partial j_1 \partial j_2 \partial j_3} = [(-1)^3 (j_k V_{1k})(j_k V_{2k})(j_k V_{3k}) + (-1)^2 (j_k V_{3k}) V_{12}] \quad (11.7)$$

$$+ (-1)^2 V_{13} (j_k V_{2k}) + (-1)^2 V_{23} (j_k V_{1k})] e^{-\frac{1}{2} j_k V_{kl} j_l} \quad (11.8)$$

Her er det underforstått integrasjon over gjentatte indeks som ikke er separert med paranteser.

Ut i fra det overstående følger spesielt:

$$\langle \phi_1 \phi_2 e^{i \phi_k j_k} \rangle = [V_{12} - (j_k V_{k1})(j_k V_{k2})] e^{-\frac{1}{2} j_k V_{kl} j_l} \quad (11.9)$$

$$\langle \phi_1 \phi_2 \phi_3 \phi_4 e^{i \phi_k j_k} \rangle = [(-1)^4 (j_k V_{k1})(j_k V_{k2})(j_k V_{k3})(j_k V_{k4})] \quad (11.10)$$

$$+ (-1)^3 \sum_{i < j}^4 V_{ij} \prod_{l \neq i,j}^4 (j_k V_{kl}) \quad (11.11)$$

$$+ (-1)^2 (V_{12} V_{34} + V_{13} V_{24} + V_{14} V_{23})] e^{-\frac{1}{2} j_k V_{kl} j_l} \quad (11.12)$$

Og ved å sette $j = 0$:

$$\langle \phi_1 \phi_2 \rangle = V_{12} \quad (11.13)$$

$$\langle \phi_1 \phi_2 \phi_3 \phi_4 \rangle = V_{12} V_{34} + V_{13} V_{24} + V_{14} V_{23} \quad (11.14)$$

$$\langle \phi_1 \phi_2 \cdots \phi_{2n} \rangle = V_{12} \cdots V_{2n-1, 2n} + andre kontraksjoner \quad (11.15)$$

$$\langle \phi_1 \phi_2 \cdots \phi_{2n+1} \rangle = 0 \quad (11.16)$$

De to siste påstandene krever egentlig et induksjonsbevis, som jeg sløyfer her. Eventuelt kan de innsees mere direkte ved å rekkeutvikle de to sidene i likning (11.1). Resultatet refereres til som Wick's teorem når det kommer opp i forbindelse med Kvantefeltteori. Der brukes det til å utlede de såkalte Feynmann reglene, som bl.a. brukes ved beregninger av spredningsprosesser. Noen går så langt som til å si at Feynmann reglene for en gitt teori er teorien. I praksis er ikke dette så langt fra sannheten.

Skal så se på noen formler som gjelder for vårt spesielle potensial gitt ved den inverse operatoren:

$$V^{-1} = \frac{1}{2\pi} [\Lambda^{-2} \nabla^4 - \nabla^2 + \epsilon^2] \quad (11.17)$$

Og hvor det er verdt å minne om at:

$$V(0) = \frac{1}{2} \ln \frac{\Lambda^2}{\epsilon^2} \quad (11.18)$$

P.g.a. likning (11.17) kan en nå beregne følgende funksjonalintegral:

$$\left\langle e^{-\frac{1}{2} \int dx m^2 \frac{\phi^2}{2\pi}} \right\rangle_{\epsilon^2} = e^{f(m^2)} \quad (11.19)$$

P.g.a. normeringen kan en notere seg med en gang at $f(0) = 0$. Beregningen skjer enklest ved å betrakte:

$$f'(m^2) = \frac{\left\langle -\frac{1}{2} \int dx \frac{\phi^2}{2\pi} e^{-\frac{1}{2} \int dx m^2 \frac{\phi^2}{2\pi}} \right\rangle}{e^{-\frac{1}{2} \int dx m^2 \frac{\phi^2}{2\pi}}} = -\frac{1}{2} \int dx \left\langle \frac{\phi^2}{2\pi} \right\rangle_{\epsilon^2 \rightarrow \epsilon^2 + m^2} \quad (11.20)$$

$$= -\frac{1}{2} \frac{V}{2\pi} V^{\epsilon^2 \rightarrow \epsilon^2 + m^2}(0) = -\frac{V}{8\pi} \ln \frac{\Lambda^2}{\epsilon^2 + m^2} \quad (11.21)$$

som ved en integrasjon gir:

$$f(m^2) = \int_0^{m^2} f'(x) dx = \frac{V}{8\pi} [\epsilon^2 \ln \frac{\epsilon^2 + m^2}{\epsilon^2} + m^2 \ln \frac{e^{-1}(\epsilon^2 + m^2)}{\Lambda^2}] \quad (11.22)$$

I senere beregninger trenges også:

$$g(m^2) = \left\langle e^{\frac{1}{2}\beta V(0)\gamma^2} \int dx e^{i\sqrt{\beta}\gamma\phi(x)} \right\rangle_{\epsilon^2 \rightarrow \epsilon^2 + m^2} \stackrel{(11.3)}{=} V e^{\frac{1}{2}\beta\gamma^2[V(0)-V^{\epsilon^2 \rightarrow \epsilon^2 + m^2}(0)]} \quad (11.23)$$

$$= V e^{\frac{\beta\gamma^2}{4} \ln \frac{\epsilon^2 + m^2}{\epsilon^2}} \quad (11.24)$$

Da en kunne beregne et spesielt funksjonalintegral ved å variere ϵ parameteren skulle en også kunne beregne et tilsvarende spesielt funksjonalintegral ved å variere Λ parameteren. Dette er ikke fullt så trivielt fordi en møter problemet:

$$\left\langle \int dx \phi(x) \nabla^4 \phi(x) \right\rangle_{\Lambda^{-2} \rightarrow \Lambda^{-2} + a^2} \quad (11.25)$$

istedet for likning (11.20).

11.2 Momenter

Ta utgangspunkt i:

$$\langle \mu[\phi] e^{tA[\phi]} \rangle = e^{\Omega(t)} \quad (11.26)$$

Finner da¹:

$$\Omega'(t) = \frac{\langle \mu A e^{tA} \rangle}{\langle \mu e^{tA} \rangle} \stackrel{def}{=} \langle A \rangle_{\mu,t} \quad (11.27)$$

$$\Omega''(t) = \langle A^2 \rangle_{\mu,t} - \langle A \rangle_{\mu,t}^2 = \langle (A - \langle A \rangle_{\mu,t})^2 \rangle_{\mu,t} \quad (11.28)$$

For å fortsette utviklingen er det praktisk å påpeke at:

$$\langle B[\phi] \rangle'_{\mu,t} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\langle Be^{tA} \rangle_{\mu,t}}{\langle e^{tA} \rangle_{\mu,t}} \right) = \langle AB \rangle_{\mu,t} - \langle A \rangle_{\mu,t} \langle B \rangle_{\mu,t} + \langle B' \rangle_{\mu,t} \quad (11.29)$$

$$\langle (A - \langle A \rangle_{\mu,t})^{n+1} \rangle_{\mu,t} = \langle A(A - \langle A \rangle_{\mu,t})^n \rangle_{\mu,t} \quad (11.30)$$

$$= \langle A \rangle_{\mu,t} \langle (A - \langle A \rangle_{\mu,t})^n \rangle_{\mu,t} \quad (11.31)$$

Finner da videre:

$$\Omega^{(3)}(t) = \left(\langle (A - \langle A \rangle_{\mu,t})^2 \rangle_{\mu,t} \right)' = \langle A(A - \langle A \rangle_{\mu,t})^2 \rangle_{\mu,t} \quad (11.32)$$

$$= \langle A \rangle_{\mu,t} \langle (A - \langle A \rangle_{\mu,t})^2 \rangle_{\mu,t} - 2 \langle A \rangle'_{\mu,t} \langle A - \langle A \rangle_{\mu,t} \rangle_{\mu,t} \quad (11.33)$$

$$= \langle (A - \langle A \rangle_{\mu,t})^3 \rangle_{\mu,t} \quad (11.34)$$

¹Dette er samme ide som den man bruker for å finne energi og varmekapsitet. Forskjellen er at midlingen er byttet ut med en funksjonal midling.

Men den neste avviker:

$$\Omega^{(4)}(t) = \langle (A - \langle A \rangle_{\mu,t})^4 \rangle_{\mu,t} \quad (11.35)$$

$$-3 \langle (A - \langle A \rangle_{\mu,t})^2 \rangle_{\mu,t} \langle (A - \langle A \rangle_{\mu,t})^2 \rangle_{\mu,t} \quad (11.36)$$

$$= \langle (A - \langle A \rangle_{\mu,t})^4 \rangle_{\mu,t} - 3 \langle (A - \langle A \rangle_{\mu,t})^2 \rangle_{\mu,t}^2 \quad (11.37)$$

For å regne ut høyere ordens ledd er en annen notasjon praktisk. Innfører forkortelsen $\{n\} \stackrel{\text{def}}{=} \langle (A - \langle A \rangle_{\mu,t})^n \rangle_{\mu,t}$. Derivasjonsregelen likning (11.29) blir da:

$$\{n\}' = \{n+1\} - n\{2\}\{n-1\}, \quad n \geq 2 \quad (11.38)$$

Merk og at:

$$\{1\} = \langle A - \langle A \rangle_{\mu,t} \rangle_{\mu,t} = 0 \quad (11.39)$$

Nå følger greit:

$$\Omega^{(2)} = \{2\} \quad (11.40)$$

$$\Omega^{(3)} = \{2\}' = \{3\} - 2\{2\}\{1\} = \{3\} \quad (11.41)$$

$$\Omega^{(4)} = \{3\}' = \{4\} - 3\{2\}\{2\} = \{4\} - 3\{2\}^2 \quad (11.42)$$

$$\Omega^{(5)} = \{3\}'' = \{5\} - 4\{2\}\{3\} - 6\{2\}\{3\} = \{5\} - 10\{2\}\{3\} \quad (11.43)$$

$$\Omega^{(6)} = \{3\}''' = \{6\} - 5\{2\}\{4\} - 10[\{3\}^2 + \{2\}(\{4\} - 3\{2\}^2)] \quad (11.44)$$

$$= \{6\} - 15\{2\}\{4\} - 10\{3\}^2 + 30\{2\}^3 \quad (11.45)$$

$$\Omega^{(7)} = \{7\} - 21\{5\}\{2\} - 35\{3\}\{4\} + 210\{3\}\{2\}^2 \quad (11.46)$$

Og slik kan man fortsette, men det blir stadig mere arbeid. Det som er klart er at:

$$\Omega^{(n)} = \{2\}^{(n-1)} = \sum_{(k_1+\dots+k_n)=n} o_k^n \{k_1\} \cdots \{k_n\} \quad (11.47)$$

Prøvde, uten å lykkes, å finne et generelt uttrykk for o_k^n . Det er nærliggende å tro at en (eller annen) grafmetode ville føre fram. Forsøkte og med en genererende funksjonsmetode². Problemet er produktleddet som framkommer ved derivasjonsregelen. J.m.f. Appendix A for noen resultater.

En Taylorrekke om $t = 0$ evaluert i $t = 1$ gir nå:

$$\Omega(1) = \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\Omega^{(n)}(0)}{n!} + \frac{\Omega^{(N)}(\tau)}{N!}, \quad 0 \leq \tau \leq 1 \quad (11.48)$$

hvor koeffisientene $\Omega^{(n)}(0)$ er fastlagt av overstående regning. Med eksplisitte uttrykk for koeffisientene kunne en kanskje klare å utføre noen av summasjonene som ville inngå (koeffisientene er jo gitt ved rekker av type likning (11.47)).

² Dette førte mye lenger og noen resultat ble funnet!

11.3 En nyttig ulikhet

Ser på spesialtilfellet $N = 2$ i likning (11.48):

$$\Omega(1) = \ln \langle \mu \rangle + \langle A \rangle_{\mu,0} + \frac{1}{2} \left\langle (A - \langle A \rangle_{\mu,t})^2 \right\rangle_{\mu,t}, \quad 0 \leq t \leq 1 \quad (11.49)$$

Da restleddet klart er positivt finnes ulikheten:

$$\Omega(1) \geq \ln \langle \mu \rangle + \langle A \rangle_{\mu,0} \quad (11.50)$$

Velger nå A og μ slik at $\Omega(1) = pV\beta$. Den enkleste varianten finnes ved:

$$\mu = 1 \quad (11.51)$$

$$A = S[\phi] \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{\gamma} z_{\gamma} e^{\frac{1}{2}\beta\gamma^2 V(0)} \int e^{i\gamma\sqrt{\beta}\phi(x)} dx \quad (11.52)$$

$$\langle \mu \rangle = 1 \quad (11.53)$$

$$\langle A \rangle_{\mu=1,t=0} \stackrel{(11.3)}{=} V \sum_{\gamma} z_{\gamma} \quad (11.54)$$

$$p\beta \geq \sum_{\gamma} z_{\gamma} \quad (11.55)$$

Ved ideell gass (følger også av overstående med alle $\gamma = 0$) fåes likhet. Merk at:

$$p_{\text{ikke ideell}}(n, T) \leq p_{\text{ideell}}(n, T) \quad (11.56)$$

ikke er i strid med likning (11.55). Sistnevnte er det forventede resultat hvis en har tiltrekning mellom partiklene.

Mere matnyttig blir det hvis en velger:

$$\mu[\phi] = e^{-\frac{1}{2} \int m^2 \frac{\phi^2}{2\pi} dx} \quad (11.57)$$

$$A = S[\phi] + \frac{1}{2} \int m^2 \frac{\phi^2}{2\pi} dx \quad (11.58)$$

Benyttes nå:

$$\ln \left\langle e^{-\frac{1}{2} \int m^2 \frac{\phi^2}{2\pi} dx} \right\rangle \stackrel{(11.22)}{=} f(m^2) = \frac{V}{8\pi} [\epsilon^2 \ln \frac{\epsilon^2 + m^2}{\epsilon^2} + m^2 \ln \frac{\epsilon^{-1}(\epsilon^2 + m^2)}{\Lambda^2}] \quad (11.59)$$

$$\left\langle S[\phi] + \frac{1}{2} \int m^2 \frac{\phi^2}{2\pi} dx \right\rangle_{m,t=0} \stackrel{(11.23)}{=} \sum_{\gamma} z_{\gamma} g(m^2) + \left\langle \frac{1}{2} \int m^2 \frac{\phi^2}{2\pi} dx \right\rangle_m \quad (11.60)$$

$$\stackrel{(11.23)}{=} \sum_{\gamma} z_{\gamma} V e^{\frac{\beta\gamma^2}{4} \ln \frac{\epsilon^2 + m^2}{\epsilon^2}} - m^2 f'(m^2) \quad (11.61)$$

$$= \sum_{\gamma} z_{\gamma} V e^{\frac{\beta\gamma^2}{4} \ln \frac{\epsilon^2 + m^2}{\epsilon^2}} + m^2 \frac{V}{8\pi} \ln \frac{\Lambda^2}{\epsilon^2 + m^2} \quad (11.62)$$

Innsatt i likning (11.50) og med forkortelsen $x = \frac{\epsilon^2 + m^2}{\epsilon^2}$ finnes da ulikheten:

$$p\beta \geq \frac{1}{8\pi} \left[8\pi \sum_{\gamma} z_{\gamma} x^{\frac{\gamma^2 \beta}{4}} - x\epsilon^2 + \epsilon^2 + \epsilon^2 \ln x \right] \quad (11.63)$$

Denne stemmer overens med likning (11.55) ved $x = 1$.

Vil nå gjøre likning (11.63) så skarp som mulig ved å maksimalisere høyresiden med hensyn på x . Spesialiserer nå til det symmetriske tilfellet $z_+ = z_- = z$ og andre $z_{\gamma} = 0$. Får da å maksimalisere:

$$F(x) = 16\pi z x^{\frac{\beta}{4}} - x\epsilon^2 + \epsilon^2 + \epsilon^2 \ln x \quad (11.64)$$

$$F'(x) = 4\pi \beta z x^{\beta/4} + \epsilon^2/x - \epsilon^2 = 0 \quad (11.65)$$

Ved å se på dette i grensen null skjerming, $\epsilon \rightarrow 0$:

$$x = \frac{\epsilon^2 + m^2}{\epsilon^2} \simeq \frac{m^2}{\epsilon^2} \gg 1 \quad (11.66)$$

finnes fra likning (11.65):

$$x = \left(\frac{4\pi \beta z}{\epsilon^2} \right)^{\frac{1}{1-\beta/4}} \quad (11.67)$$

Av likning (11.65) ser en at likning (11.67) gir et maksimalpunkt når $\beta < 4$ og et minimalpunkt når $\beta > 4$. Dette siste viser at $p\beta$ ikke kan representerere noen fysisk størrelse i dette tilfellet da denne kan gjøres vilkårlig stor ved stor x , uavhengig av ϵ .

Beste mulige ulikhet er da:

$$p\beta \geq \frac{1}{8\pi} \left[16\pi z \left(\frac{4\pi\beta z}{\epsilon^2} \right)^{\frac{\beta/4}{1-\beta/4}} - \left(\frac{4\pi\beta z}{\epsilon^2} \right)^{\frac{1}{1-\beta/4}} \epsilon^2 + \epsilon^2 + \epsilon^2 \ln \left(\frac{4\pi\beta z}{\epsilon^2} \right)^{\frac{1}{1-\beta/4}} \right] \quad (11.68)$$

$$= \frac{1}{8\pi} \left[\left(\frac{4\pi\beta z}{\epsilon^2} \right)^{\frac{1}{1-\beta/4}} \epsilon^2 (4/\beta - 1) + \epsilon^2 + \epsilon^2 (1 - \beta/4) \ln \frac{4\pi\beta z}{\epsilon^2} \right] \quad (11.69)$$

I grensen $\epsilon \rightarrow 0$ går det første ledet mot ∞ mens de andre går mot 0. Ledet:

$$(4/\beta - 1) \quad (11.70)$$

er også verdt en kommentar. $4/\beta$ kommer fra ideell gass ledet mens 1 kommer fra at man ser på tilfellet $x \neq 1$. Det er fristende å anta at likning (11.70) er starten på en rekke i β som kan oppnås ved åta med flere ledd fra likning (11.48).

11.4 Varmekapasiteten

Resultatet i likning (??) gir i tidligere notasjon:

$$g(\beta) = \frac{\epsilon^2}{8\pi} (4/\beta - 1) \quad (11.71)$$

$$h(\beta) = \frac{4\pi\beta}{\epsilon^2} \quad (11.72)$$

Varmekapasiteten beregnes da ved:

$$g'/g = -\beta^{-1}/(1 - \beta/4) \quad (11.73)$$

$$(g'/g)' = -\beta^{-1} \frac{1/4}{(1-\beta/4)^2} + \beta^{-2} \frac{1}{1-\beta/4} \quad (11.74)$$

$$(h'/h)' = (1/\beta)' = -\beta^{-1} \quad (11.75)$$

$$c_V = n + n\beta^2 [(g'/g)'(1 - \beta/4) - \frac{1}{2}g'/g - \frac{1}{16} \cdot \frac{1}{1-\beta/4} + (h'/h)'] \quad (11.76)$$

$$= n + n\beta/4 \quad (11.77)$$

som er i full overensstemmelse med Debye-Hückel resultatet. Merk at ingen tilnærmelser var nødvendig for å komme fra likning (11.71) og likning (11.72) til likning (11.76).

Del V

Oppsummering

Her er det bare en ting å si: For en høytemperaturutvikling må funksjonalintegralformuleringen forfølges videre!

Del VI

Appendiks

Tillegg A

En Spesiell Rekke

Oppsummerer resultatene fra kapittel 11:

$$(pV\beta)_D = \ln \langle \mu \rangle + \langle A \rangle_m \quad (\text{A.1})$$

$$= \frac{V}{8\pi} \left[\left(\frac{4\pi\beta z}{\epsilon^2} \right)^{\frac{1}{1-\beta/4}} \epsilon^2 (4/\beta - 1) + \epsilon^2 + \epsilon^2 (1 - \beta/4) \ln \frac{4\pi\beta z}{\epsilon^2} \right] \quad (\text{A.2})$$

$$pV\beta = (pV\beta)_D + \frac{1}{2!} \{2\} + \frac{1}{3!} \{3\} \quad (\text{A.3})$$

$$+ \frac{1}{4!} [\{4\} - 3\{2\}^2] \quad (\text{A.4})$$

$$+ \frac{1}{5!} [\{5\} - 10\{3\}\{2\}] \quad (\text{A.5})$$

$$+ \frac{1}{6!} [\{6\} - 15\{4\}\{2\} - 10\{3\}^2 + 30\{2\}^3] \quad (\text{A.6})$$

$$+ \dots \quad (\text{A.7})$$

$$+ \frac{1}{n!} [\{n\} + \dots] \quad (\text{A.8})$$

$$+ \dots \quad (\text{A.9})$$

hvor jeg minner om at:

$$\{n\} = \langle (A - \langle A \rangle_m)^n \rangle_m \quad (\text{A.10})$$

$$\langle \dots \rangle_m = \langle \dots \rangle_{\epsilon^2 \rightarrow \epsilon^2 + m^2} \quad (\text{A.11})$$

$$\epsilon^2 + m^2 = x\epsilon^2 = \left(\frac{4\pi\beta z}{\epsilon^2} \right)^{\frac{1}{1-\beta/4}} \epsilon^2 \quad (\text{A.12})$$

Kan nå ta hensyn til alle ledd av form $\frac{1}{n!} \{n\}$ i likning (A.3) ved å se på summen:

$$\sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} \{n\} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \{n\} - 1 \stackrel{(A.10)}{=} \langle e^{A - \langle A \rangle_m} \rangle_m - 1 \quad (A.13)$$

$$\langle e^A \rangle_m = \left\langle e^{S + \frac{1}{2} \int m^2 \frac{\phi^2}{2\pi} dx} \right\rangle_m = \frac{\left\langle e^{S + \frac{1}{2} \int m^2 \frac{\phi^2}{2\pi} dx} \mu \right\rangle}{\langle \mu \rangle} = \frac{\langle e^S \rangle}{\left\langle e^{-\frac{1}{2} \int m^2 \frac{\phi^2}{2\pi} dx} \right\rangle} = \frac{e^{pV\beta}}{e^{\langle \mu \rangle}} \quad (A.14)$$

Hvis andre korreksjoner i likning (A.3) neglisjeres så følger:

$$x = pV\beta - (pV\beta)_D = e^x - 1 + korr. \simeq e^x - 1 \Rightarrow x = 0 \quad (A.15)$$

Med andre ord: En delsum av leddene som kunne gitt korreksjoner gir 0 bidrag i grensen null skjerming.

Neste mulige ledd for bidrag er:

$$- 3 \frac{1}{4!} \{2\}^2 \quad (A.16)$$

En står nå med mange muligheter. En kan summere en gruppe til med ledd fra likning (A.3) eller ledet i likning (A.16) kan beregnes.

Det er farer forbundet med å summere kun deler av en totalsum når det gjelder konvergensspørsmål¹, men det er utvilsomt mest fristende.

Vil derfor finne uttrykk for koeffisientene i :

$$\Omega^{(2)} = \{2\} \quad (A.17)$$

$$\Omega^{(3)} = \{2\}' = \{3\} - 2\{2\}\{1\} = \{3\} \quad (A.18)$$

$$\Omega^{(4)} = \{3\}' = \{4\} - 3\{2\}\{2\} = \{4\} - 3\{2\}^2 \quad (A.19)$$

$$\Omega^{(5)} = \{3\}'' = \{5\} - 4\{2\}\{3\} - 6\{2\}\{3\} = \{5\} - 10\{2\}\{3\} \quad (A.20)$$

$$\Omega^{(6)} = \{3\}''' = \{6\} - 5\{2\}\{4\} - 10[\{3\}^2 + \{2\}(\{4\} - 3\{2\}^2)] \quad (A.21)$$

$$= \{6\} - 15\{2\}\{4\} - 10\{3\}^2 + 30\{2\}^3 \quad (A.22)$$

$$\Omega^{(7)} = \{7\} - 21\{5\}\{2\} - 35\{3\}\{4\} + 210\{3\}\{2\}^2 \quad (A.23)$$

¹Se f.eks. $1 - 1 + 1 - 1 + 1 - 1 + \dots (-1)^n + \dots \neq (1 - 1) + (1 - 1) + \dots = 0$

$$\Omega^{(n)} = \{n\} - a_n \{n-2\} \{2\} - b_n \{n-3\} \{3\} + \dots \quad (\text{A.24})$$

Ved derivasjon av overstående finner en følgende rekursjonsformel for a_n :

$$a_{n+1} = n + a_n, \quad n \geq 5 \quad (\text{A.25})$$

som gir at a_n er summen av de $n-1$ første heltallene:

$$a_n = \frac{1}{2}n(n-1) \quad (\text{A.26})$$

Tilsvarende finnes:

$$b_n = \frac{1}{6}n(n-1)(n-2), \quad n \geq 7 \quad (\text{A.27})$$

Og slik kan man fortsette.

La oss nå se på konsekvensen av likning (A.25). Hvis en tar med ledd av denne typen og finnes:

$$x = e^x - 1 + \frac{1}{2} \{2\} (e^x - 1 - \frac{1}{2} \{2\}) \quad (\text{A.28})$$

Her ser en at $x = 0$ ikke lenger er en løsning. En tilnærmet løsning for liten x blir:

$$x = \frac{1}{2} \{2\} \quad (\text{A.29})$$

Dette er det samme som en ville funnet uten å summere noen rekker i det hele tatt! Før noe mer gjøres her bør $\{2\}$ beregnes. Dette har jeg dessverre ikke funnet tid til nå i dette prosjektet.

Del VII

Referanser

Bibliografi

- [1] Brout,R.: Physics reports. Volum 10c,Number 1,Mars 1974. North-Holland Publishing Company.
- [2] Kittel,Charles og Kroemer,Herbert: Thermal Physics. 2nd Edition, FREEMAN, 1980.
- [3] Hemmer,P.C.: Statistisk mekanikk. Tapir, 1970.
- [4] Hemmer,P.C.: Kvantemekanikk. Tapir, 1980.
- [5] J.S.Høye,K.Olaussen: Physica, 104A:447 (1980)
- [6] Eugene,Merzbacher: Quantum Mechanics. 2nd. edition, Wiley, 1970.
- [7] Olsen,Haakon: Theory of fields. Kompendium,AVH.
- [8] Feynman,R.P.: Statistical Mechanics, A set of Lectures. Benjamin, 1972.
- [9] Landau,L.D. og Lifshitz,E.M. Course of theoretical physics,Statistical Physics. 3rd Edition Part 1 Pergamon Press, 1985.
- [10] Landau,L.D. og Lifshitz,E.M. Course of theoretical physics,Statistical Physics. Part 2 Pergamon Press, 1984
- [11] Abrikosov, Gorkov og Dzyaloshinski. METHODS OF QUANTUM FIELD THEORY IN STATISTICAL PHYSICS. 1.utgave PRENTICE-HALL, 1964.
- [12] Huang,Kerson: Quarks Leptons and Gauge Fields. World Scientific, 1982.
- [13] Ramond, Pierre: Field Theory, A Modern Primer. Benjamin/Cummings, 1981.
- [14] Linn,C.C. og Segel,L.A.: Mathematics applied to deterministic problems in the natural sciences. Macmillan, 1974.
- [15] Royden,H.L.: Real Analysis. 2nd edition, Macmillan 1968.
- [16] Wiegel,F.W. Physics reports. Volum 16c,Number 2,Februar 1975, North-Holland Publishing Company.
- [17] Balakrishnan,A.V.: Applied Functional Analysis. Springer, 1976.

- [18] Simon,Barry: Functional integration and Quantum Physics. Academic Press, 1979.
- [19] Editert av Antoine,J.P. og Tirapegui: Functional integration Theory and Applications. Plenum, 1980.
- [20] Editert av Arthurs,A.M.: Functional integration and its Applications. Clarendon Press Oxford, 1975.
- [21] Skorohod,A.V.: Integration in Hilbert space. Springer, 1974.
- [22] Ivić,Aleksandar: The Riemann Zeta-function. Wiley, 1985.
- [23] Zagier,D.B.: Zetafunctionen und quadratische Kö rper, Springer, 1981.
- [24] Gray,Andrew og Mathews,G.B.: A treatise on Bessel functions and their Application to Physics. 2nd edition, Dover, 1966.
- [25] Bell,W.W.: Special Functions for scientists and engineers. Van Nostrand, 1968.
- [26] Øgrim,Otto. Størrelser og enheter i fysikken. 4.utgave,2.opplag, Universitetsforlaget, 1980.
- [27] Kringlebotn,M. Rapportskriving. Fysisk Institutt,NTH, 1971.
- [28] Frölich, Jürg: Classical and Quantum Statistical Mechanics in One and Two Dimensions:Two-Component Yukawa-and Coulomb Systems. Commun.math.Phys.47,233-268(1976), Springer.
- [29] Saglio,Adriana M.: Vacuum structure of the coulomb gas in two dimensions. Nuclear Physics B210[FS6](1982)369-376, North-Holland Publishing Company.
- [30] Hauge,E.H. og Hemmer,P.C.: The Two-Dimensjonal Coulomb Gas. Physica Norvegica,Vol.5,Nos 3-4,209-217(1971).
- [31] Hauge,E.H.: Tilstandsaligning for $T \downarrow 1/6$, Privat notat (1971?).
- [32] Samuel,Stu: Grand Partition function in field theory with applications to Sine-Gordon field theory, Physical Review D, Vol 18,Nu 6(1978),1916-1932, The American Physical Society.
- [33] Hansen,Jean-Pierre and Clerouin,Jean: Delocalization Transition of a Classical Two-Dimensional Coulomb Lattice. Physical Review Letters,Vol 54,Nu 21(1985)2277-2280. The American Physical Society.
- [34] Viot,P.: Modified Born-Green-Yvon equations for the two dimensional Coulomb gas. Physica 131A(1985)197-211.1982)369-376, North-Holland Physics Publishing Division.

- [35] Shukla,Prabodh: Two-dimensional Neutral Coulomb gas. J.Phys.A:Math.Gen.18(1985)2087-2094. Great Britain The Institute of Physics.
- [36] Minnhagen,Petter: New renormalization equations for the Kosterlitz-Thouless transition. Physical Review B,Vol 32,Nu 5(1985)3088-3102. The American Physical Society.
- [37] Hansen,J.P. and Viot,P.: Two-body Correlations and Pair formation Two-Dimensional Coulomb gas. Journal of Statistical Physics, Vol 38,Nos.5/6(1985)823-850, Plenum Publishing Corporation.
- [38] Hinrichsen,Einar L.: Den to-dimensjonale Coulombgass. Hoveddoppgave til Cand.Scient. graden. Fysisk institutt,Universitete i Oslo. 1983.